



COPPE/UFRJ

**ABORDAGEM ALGÉBRICO-DIFERENCIAL DA OTIMIZAÇÃO DINÂMICA DE
PROCESSOS COM ÍNDICE FLUTUANTE**

Thiago Corrêa do Quinto

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Orientadores: Evaristo Chalbaud Biscaia Jr.

Argimiro Resende Secchi

Rio de Janeiro

Setembro de 2010

ABORDAGEM ALGÉBRICO-DIFERENCIAL DA OTIMIZAÇÃO DINÂMICA DE
PROCESSOS COM ÍNDICE FLUTUANTE

Thiago Corrêa do Quinto

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO
LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE)
DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS
REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM
CIÊNCIAS EM ENGENHARIA QUÍMICA.

Examinada por:

Prof. Evaristo Chalbaud Biscaia Jr., D.Sc.

Prof. Argimiro Resende Secchi, D.Sc.

Dra. Roberta Chasse Vieira, D.Sc.

Prof. Amaro Gomes Barreto Jr., D.Sc.

Prof. Príamo Albuquerque Melo Junior, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL
SETEMBRO DE 2010

Quinto, Thiago Corrêa do

Abordagem Algébrico-Diferencial Da Otimização Dinâmica De Processos Com Índice Flutuante/ Thiago Corrêa do Quinto. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2010.

XII, 97 p.: il.; 29,7 cm.

Orientadores: Evaristo Chalbaud Biscaia Jr.

Argimiro Resende Secchi

Dissertação (mestrado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Química, 2010.

Referencias Bibliográficas: p. 87-95.

1. Otimização Dinâmica. 2. Equações Algébrico-diferenciais. 3. Índice Flutuante. I. Biscaia Jr., Evaristo Chalbaud *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Química. III. Título.

*Para Kelly, pelo amor,
carinho, compreensão e fé
depositada em mim.*

Agradecimentos

Aos meus pais, Elias e Lana, pelo apoio, carinho e compreensão.

À minha amada esposa, Kelly, que nunca deixou que os desafios encontrados nesta jornada me desanimassem, suportando os fracassos, os finais de semana sacrificados e noites não dormidas e que celebra junto comigo as vitórias e barreiras transpassadas.

Aos meus amigos da turma de mestrado de 2007, por todo apoio e em especial ao Julio Dutra, que foi o intermediário e apoiador do meu retorno ao mestrado depois de um ano trancado.

Ao Professor Evaristo, que foi compreensivo quando precisei me ausentar do mestrado e principal motivador do meu reingresso, tornando-se um dos meus grandes mentores no mestrado, cujos desafios me lançaram na busca de uma solução cada vez mais aprimorada.

Ao Professor Argimiro, cuja chegada ao PEQ coincidiu com o meu reingresso, pela longanimidade, conselhos, sabedoria e predisposição a me ajudar, mesmo após o expediente, finais de semana, um verdadeiro *Monge, rsrs*. E não poderia me esquecer do “*dedo verde*” que identifica os problemas e os soluciona de uma maneira inacreditável.

Essa grande dupla de orientadores sem os quais não seria possível concluir este projeto a ponto de defendê-lo. Realmente sou muito grato.

Aos professores do PEQ, que foram compreensíveis quando precisei de uma segunda chamada nas provas finais do primeiro e seletivo período, o que me ajudou no pedido de “*pausa*” no mestrado.

Aos funcionários do PEQ, que nos bastidores, nos dão o suporte necessário para completarmos nossas tarefas.

Aos amigos da TRANSPETRO cujo apoio e conselhos me impulsionaram a concluir esta tarefa. Principalmente, ao meu gerente Marcos José pelo apoio indispensável.

E a Deus, cujas soluções e caminhos muitas das vezes não compreendemos, transformando trajetórias inviáveis em viáveis e que, na busca do ótimo, desativa as restrições mais críticas.

A todos minha eterna gratidão, Obrigado!

Resumo da Dissertação apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

ABORDAGEM ALGÉBRICO-DIFERENCIAL DA OTIMIZAÇÃO DINÂMICA DE PROCESSOS COM ÍNDICE FLUTUANTE

Thiago Corrêa do Quinto

Setembro/2010

Orientadores: Evaristo Chalbaud Biscaia Jr.

Argimiro Resende Secchi

Programa: Engenharia Química

Problemas de otimização dinâmica com restrições de desigualdade aparecem frequentemente em aplicações da engenharia de sistemas de processos. Essas restrições usualmente descrevem as condições do processo quando este opera com valores extremos das variáveis, tendo como base os limites econômicos e de segurança. Normalmente, algumas restrições de desigualdade são ativas durante a trajetória ótima, permanecendo ativas durante um período de tempo. Este comportamento pode produzir uma mudança no índice diferencial do sistema de EADs, denominado de índice flutuante e/ou variável. A nova metodologia proposta incorpora as vantagens das funções de regularização e a eliminação de variáveis adjuntas, provenientes da solução rigorosa do problema de otimização dinâmica. Este procedimento possui implementação simples e apresenta baixo custo computacional quando comparado com as técnicas tradicionais, evitando o problema de valor de contorno associado às variáveis adjuntas. Exemplos clássicos foram utilizados para validar a metodologia, obtendo-se resultados bem sucedidos comparados com os reportados na literatura.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

DIFFERENTIAL-ALGEBRAIC APPROACH OF DYNAMIC OPTIMIZATION
PROCESSES WITH FLOATING INDEX

Thiago Corrêa do Quinto

September/2010

Advisors: Evaristo Chalbaud Biscaia Jr.
Argimiro Resende Secchi

Department: Chemical Engineering

Dynamic optimization problems with inequality constraints appear frequently in process system engineering applications. These constraints usually describe the conditions when control variables or state variables operate in their extreme values, due to economic or security limits. Normally, some inequality constraints are activated along the optimal trajectory, remaining active during a period of time. This behavior could provoke a change in the differential index of the system. This kind of dynamic system is called of varying or floating index system. The proposed methodology incorporates the elimination of the adjoint variables, related with rigorous approach of the optimal dynamic problem, with a regularization technique applied to the constrained variables. This procedure can be easily implemented and presents low computational costs in comparison with traditional techniques, avoiding the boundary value problem associated with the adjoint variables. Benchmark examples have been considered to validate the methodology, and the obtained results were successfully compared with reported results from the literature.

Sumário

1. Introdução	1
2. Otimização Dinâmica de Processos	4
2.1. <i>Condições necessárias de otimalidade</i>	10
2.2. <i>Condições de Contorno Associadas ao Problema de Otimização Dinâmica</i>	15
2.3. <i>Métodos Numéricos de Solução de Otimização Dinâmica</i>	16
2.3.1. Métodos Diretos	16
2.3.2. Métodos Indiretos.....	19
2.3.3. Métodos Mistos ou Híbridos	21
2.4. <i>Métodos de Solução Analítica.....</i>	22
2.4.1. Conjunto de expressões analíticas para as entradas ótimas	24
2.4.2. Cálculo da Entrada com Eliminação das Variáveis Adjuntas	28
2.4.3. Análise dos tipos de arcos singulares livres de variáveis adjuntas	28
2.5. <i>Equações Algébrico-Diferenciais de Índice Superior.....</i>	29
2.6. <i>Funções de Regularização na Manipulação de Descontinuidades.....</i>	32
2.6.1. Reinicialização e Chaveamento entre Modelos	32
2.7. <i>Abordagem Analítica com Eliminação das Variáveis Adjuntas</i>	34
2.8. <i>Conclusões sobre o Estado da Arte da Otimização Dinâmica de Processos....</i>	35
3. Metodologia para Solução de Problemas de Otimização Dinâmica.....	36
3.1. <i>Algoritmo para Resolução do Problema de Otimização Dinâmica com Restrições.....</i>	37
3.2. <i>Aplicação da Técnica Proposta.....</i>	39
3.3. <i>Conclusões sobre a Metodologia</i>	46
4. Estudos de Casos.....	47
4.1. <i>Problemas de Otimização com Trajetória Puramente Restrita</i>	48
4.1.1. Reator semi-batelada isotérmico com restrição de segurança.....	48
4.1.2. Reator Batelada com Restrição de Pressão	53
4.2. <i>Problemas de Otimização com Trajetória Viável</i>	57
4.2.1. Reator isotérmico semi-batelada com reações paralelas e restrições de seletividade	57
4.2.2. Mistura de Catalisadores.....	61
4.3. <i>Problema de Otimização com Restrição e Trajetória Viável Simultâneos.....</i>	64
4.3.1. Biorreator batelada alimentada com inibição e restrição de biomassa.....	64

4.3.2. Reator semi-batelada não-isotérmico com reações em série e restrição de remoção de calor	71
4.4. <i>Problemas de Otimização com Trajetória Viável Estendida</i>	75
4.4.1. Problema de Controle Ótimo com Restrições de Desigualdade nas Variáveis de Estado	75
4.4.2. Oscilador de Van der Pol com Restrição de Desigualdade na Variável de Estado.....	79
5. Conclusões	83
Referências Bibliográficas	87
Apêndice A	96

Índice de Figuras

Figura 2.1: O Problema da Braquistócrona: Qual é o caminho entre A e B para que a partícula M, sob ação apenas da gravidade, partindo de A chegue a B em menor tempo?	5
Figura 2.2: Reator Batelada com restrições de Pressão (FEEHERY, 1998).	9
Figura 2.3: Perfis da Variável de Controle: AMONB – restrição de trajetória de valor máximo da variável de controle; CMND – trajetória ótima; CMOND – trajetória ótima com restrição	23
Figura 3.1: Resultados Obtidos para Massa de Células.....	41
Figura 3.2: Resultados Obtidos para Massa de Produto.	42
Figura 3.3: Variação do Volume do Biorreator com o Tempo.....	42
Figura 3.4: Perfil da Variação da Vazão Controlada do Biorreator.	43
Figura 3.5: Resultados Obtidos para Massa de Células.....	44
Figura 3.6: Resultados Obtidos para Massa de Produto.	45
Figura 3.7: Variação do Volume do Biorreator com o Tempo.....	45
Figura 3.8: Perfil da Variação da Vazão Controlada do Biorreator.	46
Figura 4.1: Evolução das Concentrações de A, B e C.....	52
Figura 4.2. Resultados para o incremento do Volume.....	52
Figura 4.3: Resultados Obtidos para Ação de Controle.	53
Figura 4.4: Resultados Obtidos para as Variáveis de Estado.....	56
Figura 4.5: Perfil de Pressão no interior do Reator.	56
Figura 4.6: Ação de Controle.	57
Figura 4.7: Concentração das espécies A, B e D.....	60
Figura 4.8: Ação de Controle.	60
Figura 4.9: Perfil da Variável de Estado x_1	63
Figura 4.10: Perfil da Variável de Estado x_2	63
Figura 4.11: Perfil da Variável de Estado x_3	64
Figura 4.12: Razão de mistura dos catalisadores ao longo do reator PFR.....	64
Figura 4.13: Perfis de Concentração da Biomassa (X), Substrato (S) e Produto (P). ..	70
Figura 4.14: Ação de Controle.	70
Figura 4.15: Perfil da Variável de Controle u	74
Figura 4.16: Perfil da Variável de Controle T	75
Figura 4.17: Resultados Obtidos para Variável de Estado x_2	77
Figura 4.18: Resultados Obtidos para Variável de Estado x_3	78
Figura 4.19: Resultados Obtidos para Variável de Controle u	78

Figura 4.20: Resultados Obtidos para Variável de Controle w	79
Figura 4.21: Resultados Obtidos para Variáveis de Estado.	81
Figura 4.22: Resultados Obtidos para Variável de Controle u	82
Figura 4.23: Resultados Obtidos para Variável de Controle w	82

Índice de Tabelas

Tabela 3.1: Condições Iniciais e Constantes Utilizadas.	40
Tabela 4.1: Condições Iniciais e Constantes Utilizadas.	49
Tabela 4.2: Parâmetros e Constantes Utilizadas.	54
Tabela 4.3: Condições Iniciais e Constantes Utilizadas.	58
Tabela 4.4: Resultados obtidos para Função objetivo.....	59
Tabela 4.5: Resultados obtidos para Função objetivo.....	63
Tabela 4.6: Condições Iniciais e Constantes Utilizadas.	68
Tabela 4.7: Comparação entre resultados obtidos.....	70
Tabela 4.8: Condições Iniciais e Constantes Utilizadas.	72
Tabela 4.9: Comparação entre resultados obtidos.....	74

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

RESUMO

Este capítulo tem como objetivo apresentar a motivação, o escopo e a estrutura da presente dissertação.

Uma série de avanços nos métodos e nas ferramentas numéricas aplicadas à simulação dinâmica de processos tem ocorrido nas últimas décadas. Nos métodos modernos de simulação dinâmica, os modelos de processos são apresentados na sua forma algébrico-diferencial tal como foram concebidos, compostos por equações diferenciais referentes aos balanços de conservação e por equações algébricas, que representam as relações termodinâmicas, cinéticas de reação ou ainda restrições de operação.

Sob o ponto de vista numérico, a resolução dos modelos descritos por sistemas de equações algébrico-diferenciais depende de uma análise prévia do seu índice diferencial e da definição das condições iniciais consistentes, que são adequadas para iniciar a integração. O conceito de índice diferencial foi introduzido para quantificar o nível de dificuldade que envolve a resolução de um sistema de equações algébrico-diferencial. O estado da arte dos códigos integradores de sistemas algébrico-diferenciais permite a integração de sistemas de índice superior a 1, bastando apenas definir o índice do sistema e as condições iniciais consistentes, mas há ainda a necessidade de caracterização do índice diferencial do sistema e redução do índice para obtenção do sistema estendido necessário para a obtenção das condições iniciais consistentes.

Na engenharia química, são poucos os problemas que se apresentam como problemas de índice superior, porém, em problemas de otimização dinâmica (e controle ótimo singular), as formulações com índice superior têm sido corriqueiras. Nestes problemas, informações relevantes como mudanças físicas de processo, limitações econômicas e de segurança são anexadas sob a forma de restrições de igualdade e desigualdade nas variáveis de estado.

Um aspecto importante nestes problemas é a variação do índice diferencial como decorrência da ativação e desativação das restrições de desigualdade ao longo da trajetória de resolução. O alto custo computacional associado a cada uma das etapas envolvidas na resolução dos problemas de otimização dinâmica com índice variável (identificação da ativação e desativação das restrições, redução do índice diferencial, chaveamento e reinicialização do modelo, além dos procedimentos iterativos de otimização) motivou este trabalho que tem como objetivo a resolução de problemas de otimização dinâmica que apresentam características de índice variável com um número reduzido de procedimentos.

Para a melhor compreensão do trabalho é apresentada no segundo capítulo uma concisa revisão sobre as principais abordagens para resolução dos problemas de otimização dinâmica de processos com enfoque algébrico-diferencial, com um breve

histórico dos avanços desta área e metodologias para soluções deste tipo de problema.

No terceiro capítulo a nova metodologia é desenvolvida e aplicada a um típico problema de otimização dinâmica ou controle ótimo onde a solução ótima pode passar por arco singular.

No quarto capítulo a metodologia proposta é aplicada a exemplos típicos da engenharia química. Neste capítulo, encontram-se apresentados os modelos selecionados da literatura para teste do novo procedimento, a definição analítica das restrições, o sistema regularizado gerado pela aplicação da metodologia e os principais resultados obtidos.

No quinto e último capítulo são apresentadas as conclusões referentes ao trabalho desenvolvido bem como algumas sugestões e perspectivas para trabalhos futuros.

CAPÍTULO II

OTIMIZAÇÃO DINÂMICA DE PROCESSOS

RESUMO

Este capítulo apresenta uma revisão bibliográfica sobre otimização dinâmica de processos com enfoque algébrico-diferencial, com um breve histórico dos avanços desta área e metodologias para resolução deste tipo de problema.

A busca pelo homem por otimizar seus processos, rotinas e problemas é muito antiga. No entanto, foi somente no final do século XVII que Johann Bernoulli propôs à sociedade científica de sua época um problema, dentre outros, que é considerado o mais famoso problema da área, o problema da Braquistócrona, no qual se buscava o caminho AMB num plano vertical entre dois pontos A e B distantes, em que a partícula móvel M, sob ação apenas da aceleração da gravidade, atravessa-o em tempo mínimo.

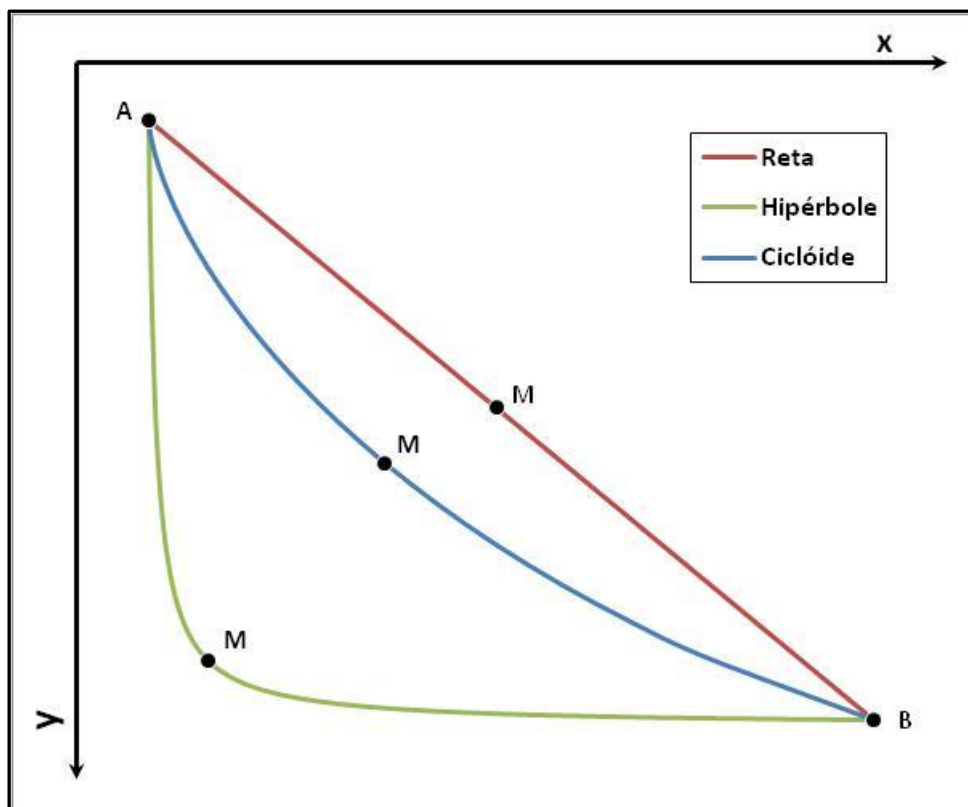


Figura 2.1: O Problema da Braquistócrona: Qual é o caminho entre A e B para que a partícula M, sob ação apenas da gravidade, partindo de A chegue a B em menor tempo?

O nascimento da teoria do cálculo variacional ocorre quando Leonard Euler, em 1744, publicou o seu livro "*Methodus inveniendi lineas curvas maximi minimive proprietate gaudentes, sive solutio problematis isoperimetrici latissimo sensu accepti*", uma referência a métodos para descobrir curvas que têm a propriedade de máximo ou de mínimo.

Em 1755, Joseph Louis Lagrange enviou a Euler seus resultados para o problema da tautócrona através de seus métodos de máximo e mínimo (método dos

multiplicadores) que, em 1756, seria aplicado ao cálculo variacional de Euler, que culminaria na equação Euler-Lagrange (O'CONNOR e ROBERTSON, 2010).

Reescrevendo o sistema de Euler-Lagrange, William Rowan Hamilton desenvolveu as bases da mecânica Hamiltoniana, mostrando que os problemas envolvendo muitas variáveis e restrições podem ser reduzidos a um conjunto de derivadas parciais de uma única função, que ficou conhecido como Hamiltoniano (HAMILTON, 1834).

Com o desenvolvimento desta teoria, surgiu uma série de aplicações práticas na física teórica, impulsionando o avanço de teorias da matemática como as equações diferenciais.

No século XX, Pontryagin (1963) formula o princípio de máximo utilizando como base o cálculo variacional, nascendo a teoria do controle ótimo, que é uma generalização das condições necessárias de Euler-Lagrange, conforme será demonstrado na Seção 2.1.

Bellman, Glicksberg e Gross (1956) confirmaram que o controle ótimo existe e é realmente do tipo bang-bang, ou seja, a solução ótima está nos extremos dos controles praticáveis. O Princípio de Bang-Bang, como ficou conhecido, foi demonstrado por LaSalle (1960) utilizando o Teorema de Liapunov. Este fato acabou dando origem ao desenvolvimento, de 1953 a 1957, por R. Bellman, de um método chamado de programação dinâmica, que pode ser visto como uma consequência da abordagem de Hamilton-Jacobi para problemas variacionais (SOUZA, 2007).

A solução de problemas de otimização dinâmica requer a determinação da trajetória da variável de controle que aperfeiçoe alguma medida de desempenho do sistema dinâmico (FEEHERY, 1998).

A otimização dinâmica surgiu como uma derivação do controle ótimo que era resolvido através da utilização do cálculo variacional, resultando em um problema de valor de contorno de difícil solução, sendo inicialmente aplicado apenas a problemas de pequenas dimensões, voltados à indústria aeronáutica e aeroespacial. Na indústria de processamento há poucas aplicações, pois os problemas envolviam modelos mais complexos e um número de variáveis muito maiores, como em Secchi *et al.* (1990).

Na década de 1970, tiveram algumas iniciativas significativas para simplificar as soluções de problemas de otimização dinâmica utilizando método *single-shooting* com Pollard e Sargent (1970) e Sargent e Sullivan (1977). Estas técnicas utilizavam a discretização dos perfis de controle com perfis constantes por partes para integrar os modelos descritos por EDOs e resolver o problema de otimização sequencialmente, do

tipo de caminho viável (*feasible path*), pois a partir de perfis de controle sugeridos se produziam trajetórias viáveis para os estados.

A parametrização das variáveis de controle e de estado possibilitou a resolução de problemas de controle ótimo através de algoritmos de otimização amplamente utilizados. Usando o método de Galerkin, Newman e Sen (1974) foram os pioneiros a utilizar o método dos resíduos ponderados. Em 1975, Tsang *et al.* apresentaram a primeira solução usando o método da colocação ortogonal global.

Na década de 1980, outros métodos de solução de problemas de otimização dinâmica foram apresentados, pois as limitações do método *single-shooting* já estavam estabelecidas. Plitt (1981) apresentou o método de discretização *multiple-shooting*, que foi consolidado por Bock e Plitt (1984), sendo aplicado na engenharia mecânica, principalmente, na otimização de movimentos de robôs (SCHULZ, 1996).

Bock (1983) e Biegler (1984) reutilizaram a colocação ortogonal aplicada na parametrização de variáveis (métodos simultâneos para solução de problemas de otimização algébrico-diferencial). Renfro (1986) e Renfro *et al.* (1987) usaram colocação *spline* em funções constantes por partes das variáveis independentes, para converter equações algébrico-diferenciais com os perfis de controle constantes por partes. Em 1987, Cuthrell e Biegler já haviam percebido os problemas de precisão e estabilidade encontrados no uso de colocação global e propuseram o uso de colocação em elementos finitos para aproximar os estados e controles usando polinômios de Lagrange para converter os sistemas de equações algébrico-diferenciais em equações algébricas. Em 1989, Logsdon e Biegler mostraram a equivalência entre o método de colocação em elementos finitos e o método de Runge-Kutta totalmente implícito. Por esta razão, consideraram que as suas propriedades de estabilidade e erros eram satisfatórias para uma discretização precisa de modelos de otimização dinâmica algébrico-diferencial. Esta representação ainda é utilizada (Bader e Ascher, 1987), pois oferece menores números de condicionamento e menores erros de arredondamento.

A abordagem simultânea se consolidou como uma boa opção para solução de problemas de otimização dinâmica, após a aplicação do método em uma série de processos químicos por Cuthrell (1986) e Cuthrell e Biegler (1989) que permitiu tratar descontinuidades nas variáveis de controles e em algumas de estados. O problema de otimização foi resolvido via Programação Não Linear. Estes métodos também foram chamados de trajetória inviável (*infeasible path*), pois a satisfação das restrições do modelo do processo são obtidas somente na solução do problema de otimização. Assim, trajetórias de controle se tornaram parte das variáveis de otimização e as

instabilidades e não-linearidades dos modelos dinâmicos puderam ser mais bem controladas. Desde então, começaram a resolver problemas de otimização algébrico-diferencial de dimensões elevadas.

Na década de 1990, os métodos sequenciais ressurgiram com a melhora dos métodos e do desempenho dos computadores. Em 1993, Vassiliadis utilizou a discretização parcial nas variáveis de controle com polinômios de Lagrange, perfis constantes e lineares por partes. Em seguida outros relatos de utilização de discretização dos controles surgiram (VASSILIADIS *et al.*, 1994; PYTLAK e VINTER, 1996; FEEHERY e BARTON, 1998). Em 1997, Leineweber *et al.* rerepresentou o método do *multiple-shooting* na sua versão simultânea, inspirado no método já apresentado por Plitt (1981). Esta abordagem permite o uso de valores inconsistentes dos estados através de uma formulação de equação algébrico-diferencial relaxada proposta por Bock *et al.* (1988).

Vassiliadis (1993) resumiu as técnicas de controle ótimo na literatura em grupos. Os métodos de discretização dos controles, ou discretização parcial, são aqueles onde se estima o perfil de controle e se calcula o perfil de estado, em seguida a função objetivo e os gradientes. Os gradientes podem ser calculados por perturbação ou pelas equações de sensibilidade (VASSILIADIS, 1993) ou pelas equações adjuntas (PYTLAK e VINTER, 1996). Esta abordagem é conhecida como método sequencial. Dentre os métodos simultâneos (discretização total), tem-se o método de colocação e colocação em elementos, utilizados por Betts (2001) e Biegler, Cervantes e Wächter, (2002).

Também houve iniciativas na combinação dos métodos direto e indireto, e em 2002, Gath desenvolveu o pacote CAMTOS – *Collocation and Multiple Shooting Trajectory Optimization Software*. Dos métodos diretos, podem ser utilizados os métodos *multi-shooting* e colocação direta – DIRCOL (STRYK, 1999)

Tanartkit e Biegler (1995) adotaram métodos rSQP simultâneos e incorporaram o solver COLDAE (ASCHER e SPITERI, 1994, 1995) na discretização dos estados usando colocação em elementos finitos, mostrando sua eficiência para resolver problemas de otimização dinâmica com poucos graus de liberdade.

Devido ao interesse pela indústria por simulação dinâmica, a solução de problemas de otimização dinâmica começou a ter certo grau de maturidade na década de 1990, surgindo uma série de estudos práticos e vários pesquisadores mostraram interesse em desenvolver ferramentas para resolvê-los. Dentre estas ferramentas, pode-se citar uma série de aplicações de otimização de equações algébrico-diferencial (ALMEIDA NETO e SECCHI, 2006; BOCK *et al.*, 1999; TANARTKIT e BIEGLER, 1995

e 1996; LEINWEBER, 1996 e 1999; PETZOLD *et al.*, 1997; PANTELIDES *et al.* 1994; VASSILIADIS, 1994).

Problemas de otimização dinâmica têm surgido em engenharia de processos e têm duas características distintas. Primeiro, os modelos dinâmicos são compostos por equações algébricas e por equações diferenciais. As equações diferenciais são tipicamente balanços de massa e de energia, enquanto que as equações algébricas surgem a partir de conectividade física de uma planta de processo e relações termodinâmicas e cinéticas. Segundo, problemas de otimização dinâmica que surgem em sistemas de engenharia de processo possuem, muitas vezes, restrições de trajetória nas variáveis de estado, resultantes de limitações físicas, de segurança e econômicas impostas pelo sistema, o que torna o problema ainda mais complexo de ser resolvido.

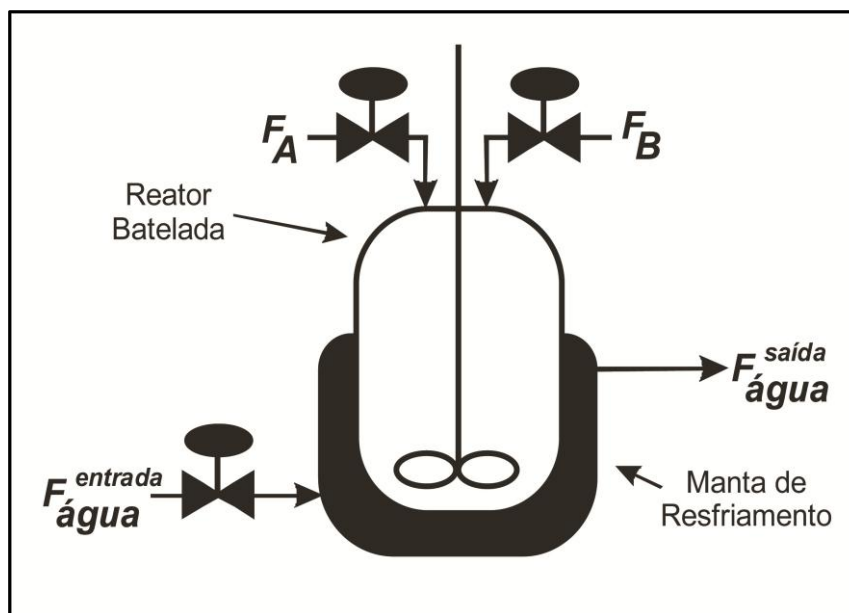


Figura 2.2: Reator Batelada com restrições de Pressão (FEEHERY, 1998).

Um exemplo simples de um problema de otimização dinâmica em engenharia de processos é apresentado na Figura 2.2, onde um conjunto de reações é realizado dentro de um reator batelada com restrição de pressão. O objetivo é maximizar a quantidade de produto em um tempo de reação fixo. Os controles disponíveis são as taxas de alimentação dos reagentes e a vazão da água de resfriamento através da camisa de resfriamento do reator. Uma vez que as reações são exotérmicas, as restrições de trajetória das variáveis de estado devem ser impostas na pressão e temperatura para mantê-las dentro de limites de segurança ao longo de todo processo.

Outros exemplos de problemas de otimização dinâmica são a determinação de transições ótimas de condições de operação de plantas químicas sujeitas às restrições de segurança, operacionais e ambientais; a determinação do perfil de temperatura que maximize a seletividade de um produto desejado em um reator batelada envolvendo reações competitivas. Em plantas reais, os perfis determinados anteriormente pela solução do problema de otimização dinâmica podem servir como *setpoints* para sistemas de controle.

2.1. Condições necessárias de otimalidade

Um sistema de equações algébrico-diferenciais (EADs) é um sistema de equações que pode ser escrito na forma implícita como:

$$f(\dot{z}, z, u, t) = 0 \quad 2.1$$

onde $\frac{\partial f}{\partial \dot{z}}$ é singular.

Equações diferenciais ordinárias (EDOs) são uma classe de EADs. Uma característica das EADs é que existem restrições algébricas na variável de estado z , que as EDOs não possuem. Estas restrições podem aparecer explicitamente como em:

$$g(x, x, y, u, t) = 0 \quad 2.2$$

$$h(x, y, u, t) = 0 \quad 2.3$$

onde $z = [x|y]$. Neste contexto, seguem alguns conceitos que serão amplamente utilizados nesta dissertação:

Índice Diferencial de EADs - É o número mínimo de vezes que o sistema de EADs (Equação 2.1) ou parte dele deve ser diferenciado em relação a t para se determinar \dot{z} como uma função contínua de z (GEAR, 1971). É uma medida do nível de dificuldade que envolve a resolução de sistemas de EADs.

EADs de Índice Superior e Redução de Índice - EADs de índice superior são as equações com índice maior do que 1. A resolução de EADs de índice superior é restrita pelas derivadas no tempo de um subsistema não vazio das equações no sistema de EADs, composto pelas chamadas restrições ocultas, que juntamente com o sistema original formam o sistema estendido. Em geral, somente uma limitada classe de EADs de índice superior pode ser resolvida diretamente usando técnicas numéricas padrões. Do ponto de vista da solução numérica, é desejável que o índice das EADs seja o menor possível devido à dificuldade associada na sua resolução, que pode ser comparada à resolução de EDOs com rigidez numérica. Entretanto, esta redução

obtida através da simples diferenciação das restrições pode deixar de satisfazer as restrições originais de maneira exata, devido ao acúmulo de erros durante a integração numérica, com sérias implicações quando elas envolvem propriedades físicas importantes. Portanto, devem ser consideradas formas de reintroduzir restrições perdidas no sistema, chamadas invariantes.

Considerando o problema de otimização dinâmica, onde o vetor inicial das variáveis de estado é conhecido (ou seja, o vetor inicial não é determinado pela otimização), as trajetórias de controle não estão sujeitas a restrições e as trajetórias de estado são restritas por EADs. Este problema pode ser expresso, matematicamente, como (KIRK, 1970; BRYSON e HO, 1975; FEEHERY, 1998) na forma abaixo:

$$\min_{u(t), t_f} J = \psi(\mathbf{x}(t_f), t_f) + \int_{t_0}^{t_f} L(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) dt \quad 2.4$$

sujeito ao sistema de EADs:

$$\mathbf{f}(\dot{\mathbf{x}}, \mathbf{x}, \mathbf{u}, t) = 0 \quad 2.5$$

com condições iniciais dadas por

$$\boldsymbol{\varphi}(\dot{\mathbf{x}}(t_0), \mathbf{x}(t_0), t_0) = 0 \quad 2.6$$

onde $J(\cdot), L(\cdot), \psi(\cdot) \rightarrow \mathbb{R}, f(\cdot), \varphi(\cdot) \rightarrow \mathbb{R}^{m_x}, x \in \mathbb{R}^{m_x}$ e $u \in \mathbb{R}^{m_u}$; J é o índice de desempenho (função objetivo ou critério de otimização); ψ é o componente da função objetivo calculada no tempo final (t_f); $\int_{t_0}^{t_f} L dt$ é o componente da função objetivo calculado dentro de um período de tempo (t_0, t_f). As variáveis de estado x nesta formulação incluem as variáveis de estado diferenciais e algébricas.

O sistema de EADs pode ter arbitrariamente índice diferencial v , e a Eq. 2.6 define as condições iniciais consistentes. Visto que o índice da Eq. 2.5 não é limitado, esta formulação pode incluir restrições de igualdade nas variáveis de estado.

A função ψ na Eq. 2.4 pode ser expressa como:

$$\psi(\mathbf{x}(t_f), t_f) = \psi(\mathbf{x}(t_0), t_0) + \int_{t_0}^{t_f} \frac{d\psi}{dt} dt \quad 2.7$$

Desde que seja admitido que o tempo inicial t_0 e as condições de estado $\mathbf{x}(t_0)$ sejam fixos, a função objetivo pode ser expressa como:

$$J = \int_{t_0}^{t_f} \bar{L}(\dot{\mathbf{x}}, \mathbf{x}, \mathbf{u}, t) dt \quad 2.8$$

onde:

$$\bar{L}(\dot{\mathbf{x}}, \mathbf{x}, \mathbf{u}, t) = \frac{d\psi}{dt} + L = \frac{\partial\psi}{\partial t} + \left[\frac{\partial\psi}{\partial \mathbf{x}} \right]^T \dot{\mathbf{x}} + L \quad 2.9$$

Uma função objetivo aumentada é formada adicionando as restrições à função objetivo através do uso das variáveis adjuntas $\lambda(t)$:

$$\bar{J} = \int_{t_0}^{t_f} [\bar{L}(\dot{\mathbf{x}}, \mathbf{x}, \mathbf{u}, t) + \lambda^T \mathbf{f}(\dot{\mathbf{x}}, \mathbf{x}, \mathbf{u}, t)] dt \quad 2.10$$

É conveniente definir o Hamiltoniano como:

$$H(\dot{\mathbf{x}}, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \lambda, t) = \bar{L}(\dot{\mathbf{x}}, \mathbf{x}, \mathbf{u}, t) + \lambda^T \mathbf{f}(\dot{\mathbf{x}}, \mathbf{x}, \mathbf{u}, t) \quad 2.11$$

Para obter as condições necessárias para a otimalidade, é necessário definir a variação de um funcional. Para o funcional:

$$\bar{J} = \int_{t_0}^{t_f} H(\dot{\mathbf{x}}, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \lambda, t) dt \quad 2.12$$

o incremento funcional é dado por:

$$\begin{aligned} \delta \bar{J} = & \int_{t_0}^{t_f} [H(\dot{\mathbf{x}} + \delta \dot{\mathbf{x}}, \mathbf{x} + \delta \mathbf{x}, \mathbf{u} + \delta \mathbf{u}, \lambda + \delta \lambda, t) - H(\dot{\mathbf{x}}, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \lambda, t)] dt \\ & + \int_{t_f}^{t_f + \delta t_f} H(\dot{\mathbf{x}}, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \lambda, t) dt \end{aligned} \quad 2.13$$

Expandindo o incremento em Séries de Taylor ao redor do ponto $(\dot{\mathbf{x}}(t), \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t))$ e extraíndo os termos que são lineares tem-se a variação de \bar{J} :

$$\delta \bar{J} = \int_{t_0}^{t_f} \left[\frac{\partial H}{\partial \dot{\mathbf{x}}} \delta \dot{\mathbf{x}} + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}} \delta \mathbf{x} + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}} \delta \mathbf{u} + \frac{\partial H}{\partial \lambda} \delta \lambda \right] dt + H(\dot{\mathbf{x}}, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \lambda, t) \delta t_f \quad 2.14$$

a qual pode ser simplificada integrando o primeiro termo por partes para se obter:

$$\begin{aligned} \delta \bar{J} = & \int_{t_0}^{t_f} \left[\left[\frac{\partial H}{\partial \dot{\mathbf{x}}} - \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial H}{\partial \dot{\mathbf{x}}} \right] \right] \delta \mathbf{x} + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}} \delta \mathbf{u} + \frac{\partial H}{\partial \lambda} \delta \lambda \right] dt + \left[\frac{\partial H}{\partial \dot{\mathbf{x}}} \right]_{t=t_f} \delta \mathbf{x}(t_f) \\ & + H(\dot{\mathbf{x}}, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \lambda, t) \delta t_f \end{aligned} \quad 2.15$$

usando a seguinte relação:

$$\delta \mathbf{x}(t_f) = \delta \mathbf{x}_f - \dot{\mathbf{x}} \delta t_f \quad 2.16$$

e substituindo na 2.15, temos:

$$\begin{aligned} \delta \bar{J} = & \left[\frac{\partial H}{\partial \dot{\mathbf{x}}} \right]_{t=t_f} \delta \mathbf{x}_f + \left[H - \frac{\partial H}{\partial \dot{\mathbf{x}}} \dot{\mathbf{x}} \right]_{t=t_f} \delta t_f \\ & + \int_{t_0}^{t_f} \left[\left[\frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}} - \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial H}{\partial \dot{\mathbf{x}}} \right] \right] \delta \mathbf{x} + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}} \delta \mathbf{u} + \frac{\partial H}{\partial \lambda} \delta \lambda \right] dt \end{aligned} \quad 2.17$$

As condições necessárias de primeira ordem para o ótimo podem ser encontradas fazendo a variação de \bar{J} ser igual à zero. As condições são:

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}} - \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial H}{\partial \dot{\mathbf{x}}} \right] = 0 \quad 2.18$$

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}} = 0 \quad 2.19$$

$$\frac{\partial H}{\partial \lambda} = 0 \quad 2.20$$

$$\left[\frac{\partial H}{\partial \dot{\mathbf{x}}} \right]_{t=t_f} \delta \mathbf{x}_f + \left[H - \frac{\partial H}{\partial \dot{\mathbf{x}}} \dot{\mathbf{x}} \right]_{t=t_f} \delta t_f = 0 \quad 2.21$$

As condições dadas pelas Equações 2.18 a 2.21 e a condição inicial dada pela Equação 2.6, definem um sistema de EADs de valor de contorno. A Equação 2.18 também é chamada de equação de coestado. Estas condições podem ser simplificadas, expandindo os termos que incluem ψ na Equação 2.18 e admitindo que as derivadas de segunda ordem sejam contínuas:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \left[\frac{\partial \psi}{\partial \dot{\mathbf{x}}} \dot{\mathbf{x}} + \frac{\partial \psi}{\partial t} \right] - \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{x}}} \left[\frac{\partial \psi}{\partial \dot{\mathbf{x}}} \dot{\mathbf{x}} \right] \right] = \left[\frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathbf{x} \partial t} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathbf{x}^2} \dot{\mathbf{x}} \right] - \left[\frac{\partial^2 \psi}{\partial t \partial \mathbf{x}} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathbf{x}^2} \dot{\mathbf{x}} \right] = 0 \quad 2.22$$

Substituindo a Equação 2.22 em 2.18 a 2.21, estas equações podem ser simplificadas:

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{x}} + \lambda^T \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} - \dot{\lambda}^T \frac{\partial f}{\partial \dot{\mathbf{x}}} - \lambda^T \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial f}{\partial \dot{\mathbf{x}}} \right] = 0 \quad 2.23$$

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{u}} + \lambda^T \frac{\partial f}{\partial \mathbf{u}} = 0 \quad 2.24$$

$$f(\dot{x}, x, u, t) = 0 \quad 2.25$$

$$\left[\lambda^T \frac{\partial f}{\partial \dot{x}} + \frac{\partial \psi}{\partial x} \right]_{t=t_f} \delta x_f + \left[\frac{\partial \psi}{\partial t} + L + \lambda^T f - \lambda^T \left[\frac{\partial f}{\partial \dot{x}} \right] \dot{x} \right]_{t=t_f} \delta t_f = 0 \quad 2.26$$

Estas condições são uma generalização das condições necessárias, também chamadas de equações de Euler-Lagrange, para a otimização dinâmica de sistemas de EADs. É interessante notar que embora a transformação 2.23 – 2.25 possa ser aplicada para qualquer EAD, a Equação 2.26 não pode ser utilizada diretamente em sistemas de EADs de índice superior. Condições iniciais consistentes para EADs de índice superior podem somente ser obtidas com o sistema estendido correspondente e da mesma forma, a Equação 2.26 deve ser aplicada somente para o sistema estendido correspondente de EADs 2.23 – 2.25 (FEEHERY, 1998).

Considere o problema de otimização dinâmica com EAD a seguir:

$$\min_{\theta(t), t_f} t_f \quad 2.27$$

sujeito a:

$$\frac{dx}{dt} = u \quad 2.28$$

$$\frac{dy}{dt} = v \quad 2.29$$

$$\frac{du}{dt} = F \sin(\theta) \quad 2.30$$

$$\frac{dv}{dt} = g - F \cos(\theta) \quad 2.31$$

$$\tan(\theta) = \frac{v}{u} \quad 2.32$$

$$\left[x(0), y(0), \frac{dx}{dt} \Big|_{t=0} \right] = [0, 1, 0] \quad 2.33$$

Este exemplo é uma versão do problema da braquistócrona. O índice da EAD neste problema é igual a dois se θ for selecionada como variável de controle (FEEHERY, 1998).

A condição de optimalidade aplicada ao problema gera o seguinte sistema de EADs de variáveis adjuntas:

$$\frac{d\lambda_1}{dt} = 0 \quad 2.34$$

$$\frac{d\lambda_2}{dt} = 0 \quad 2.35$$

$$\frac{d\lambda_3}{dt} = -\lambda_1 + \lambda_5 \frac{v}{u^2} \quad 2.36$$

$$\frac{d\lambda_4}{dt} = -\lambda_2 - \lambda_5 \frac{1}{u} \quad 2.37$$

$$0 = -\lambda_3 \sin(\theta) + \lambda_4 \cos(\theta) \quad 2.38$$

A Equação 2.24 é reduzida a:

$$\lambda_3 F \cos(\theta) + \lambda_4 F \sin(\theta) + \lambda_5 \sec^2(\theta) = 0 \quad 2.39$$

Para obter as condições de contorno para este problema, é necessário considerar tanto o índice do sistema de EADs 2.28 – 2.33 como o índice do sistema estendido de EADs 2.34 – 2.39 e assim determinar o grau de liberdade dinâmico. O grau de liberdade dinâmico do sistema de EADs original determina o número de condições iniciais e o do sistema estendido de EADs determina o número de condições de contorno no final do tempo de integração. Após solução do problema chega-se à conclusão de que o caminho ótimo é uma cicloide.

2.2. Condições de Contorno Associadas ao Problema de Otimização Dinâmica

Problemas com tempo final fixo

Se o tempo final (t_f) é fixo então δt_f é igual à zero na Equação 2.26. Se a variável de estado não for especificada em t_f , as condições no ponto final têm que satisfazer a:

$$\left[\lambda^T \frac{\partial f}{\partial \dot{x}} + \frac{\partial \psi}{\partial x} \right]_{t=t_f} \delta x_f = 0 \quad 2.40$$

como δx_f é arbitrário, $\delta x_f \neq 0$ e para satisfazer a Equação 2.26:

$$\left[\lambda^T \frac{\partial f}{\partial \dot{x}} + \frac{\partial \psi}{\partial x} \right]_{t=t_f} = 0 \quad 2.41$$

Problemas com o Tempo Final Livre

Para t_f livre, a suposição de que $\delta t_f = 0$ não pode ser feita. Neste caso além das condições dadas pelas Equações 2.23 – 2.25, para o caso em que se tem as

variáveis de estado fixas no tempo final, o sistema deverá atender à seguinte condição:

$$\left[\frac{\partial \psi}{\partial t} + L + \lambda^T f - \lambda^T \left[\frac{\partial f}{\partial \dot{x}} \right] \dot{x} \right]_{t=t_f} = 0 \quad 2.42$$

Variáveis de estado especificadas no tempo final fixo

Seja o problema de otimização definido pelas Equações 2.4 – 2.6, com algumas variáveis de estado especificadas em $t = t_f$. Se x_i , o i -ésimo componente do vetor de estado x , é definido em $t = t_f$, então a variação $\delta x_i(t_f)$ na Equação 2.26 deve ser nula, pois é necessário que a Equação 2.40 seja satisfeita. A Equação 2.24, $\frac{\partial H}{\partial u} = 0$, necessita de uma condição adicional para o problema com restrição final. No presente caso, $\delta u(t)$ não é completamente arbitrário, o conjunto admissível de $\delta u(t)$ é sujeito às restrições:

$$\delta x_i(t_f) = 0 \quad i = 1, \dots, q \quad 2.43$$

Um conjunto admissível de $\delta u(t)$ pode ser definido como os valores de $\delta u(t)$ que satisfazem todas as restrições do problema.

Desde que $x_i(t_f)$ seja especificado para $i = 1, \dots, q$, é consistente considerar que:

$$\psi = \psi(x_{q+1}, \dots, x_n)_{t=t_f} \quad 2.44$$

As Equações 2.23 – 2.26 permanecem inalteradas para este caso, apenas a condição de contorno em $t = t_f$ passa a ser dada por:

$$\lambda_i(t_f) = \begin{cases} 0 & j = 1, \dots, q \\ -\frac{\partial \psi}{\partial x_j} \Big|_{t=t_f} & j = q + 1, \dots, n \end{cases} \quad 2.45$$

2.3. Métodos Numéricos de Solução de Otimização Dinâmica

2.3.1. Métodos Diretos

Com o desenvolvimento dos algoritmos para a solução dos problemas de Programação Não Linear – NLP, *Nonlinear Programming* – (BIEGLER, 1984; RENFRO *et al.*, 1987; CERVANTES, BIEGLER, 1998; BIEGLER *et al.*, 2002), a abordagem direta para a solução dos Problemas de Controle ótimo é a mais utilizada

atualmente e a que tem recebido maior atenção dos pesquisadores. Estes métodos transformam a otimização dinâmica em um NLP através de parametrização das variáveis de controle e/ou de estado. Na literatura eles são divididos em sequencial e simultâneo (BIEGLER e GROSSMANN, 2004), apesar do método *multi-shooting* não se enquadrar nestas classificações, sendo uma abordagem intermediária.

A estratégia sequencial consiste na parametrização das variáveis de controle. Neste caso, o otimizador determina o conjunto de parâmetros de controle e o sistema de EADs é integrado no tempo para obter novos valores para a função objetivo e para as restrições. Este procedimento é repetido até a convergência dos parâmetros de controle.

A estratégia simultânea consiste na parametrização das variáveis de controle e discretização das variáveis de estado. Como resultado, o sistema de EADs é transformado em um sistema de equações algébricas e o problema de otimização é transformado em um NLP de dimensão elevada.

Na literatura podem ser encontradas várias formas de discretização baseadas em aproximações por colocação ortogonal (OH; LUUS, 1977; BIEGLER, 1984), por expansões em séries (ÇELIK *et al.*, 2003) e por colocação ortogonal em elementos finitos (RENFRO, 1986; RENFRO *et al.*, 1987; CUTHREL; BIEGLER, 1987; LOGSDON; BIEGLER, 1989, 1992). Em particular, no uso de aproximações em elementos finitos, o tamanho e número de elementos podem ser determinados automaticamente, permitindo um melhor controle do erro de discretização (LOGSDON e BIEGLER, 1989; VASANTHARAJAN e BIEGLER, 1990).

As técnicas de discretização têm natureza local (métodos das diferenças finitas e volumes finitos) ou global (colocação ortogonal padrão e em elementos finitos). As técnicas de natureza local usualmente requerem um grande número de pontos de discretização para que a solução final obtida aproxime bem a solução real procurada. Isto, em geral, significa que sistemas de centenas ou milhares de equações têm que ser resolvidos simultaneamente. O processo de geração das equações, no entanto, é simples e pode ser automatizado com certa facilidade. Por sua vez, as técnicas de natureza global podem permitir considerável redução do tamanho da malha de discretização, embora o processo de geração das equações discretizadas seja significativamente mais complexo do que o caso anterior.

Os Métodos Diretos podem fornecer soluções sub-ótimas e resultados menos precisos quando comparados aos Métodos Indiretos. Possuem como vantagem a solução rápida e como desvantagem a dificuldade na determinação da otimalidade.

Um código que resolve Problema de Controle Ótimo através da abordagem do método direto é o código DIRCOL, que é um conjunto de subrotinas desenvolvido por Stryk (1999) e implementado em Fortran com o objetivo de resolver problemas de otimização dinâmica descritos por equações diferenciais de primeira ordem sujeito a restrições de igualdade e/ou desigualdade nas variáveis de controle e/ou variáveis de estado. O DIRCOL utiliza um método de colocação direto que discretiza as variáveis de estado e de controle por aproximações polinomiais por partes transformando o Problema de Controle Ótimo em NLP, que é resolvido através de Programação Quadrática Sequencial densa (SQP) pelo código NPSOL ou pelo código SNOPT apropriado para sistemas esparsos (GILL *et al.*, 1986, 1997). O código informa estimativas das variáveis adjuntas e dos eventos, resolve problemas com multi-fases, através do particionamento do sistema com estimativa dos eventos em cada fase e possui estratégia de refinamento da malha.

Cuthrel e Biegler (1987b) resolveram Problemas de Controle Ótimo sujeito a restrições de desigualdade nos perfis de estado e de controle e com dependência linear no controle, que causa arcos singulares ou perfis liga-desliga. Nestes arcos, o perfil de controle não influencia diretamente as condições de otimalidade do Hamiltoniano e a determinação do controle requer condições adicionais, que podem ser de difícil manuseio. Os autores incorporaram as equações algébricas com coeficientes desconhecidos, referentes aos resíduos oriundos da aplicação da colocação ortogonal em elementos finitos utilizando os polinômios de Lagrange como base, como restrições de igualdade ao NLP e os coeficientes como variáveis de decisão. Foram utilizadas estratégias de minimização do erro de aproximação além dos chamados superelementos, que são um nível extra de elementos utilizados na alocação adaptativa dos elementos.

Feehery e Barton (1998) utilizaram a parametrização no controle em Problemas de Controle Ótimo sujeitos a restrições nas variáveis de estado. Os autores mostram que as EADs se tornam de índice superior durante as partes restritas pelas variáveis de estado (flutuação de índice durante a trajetória) e estabeleceram a equivalência entre o Problema de Controle Ótimo com restrição de desigualdade e um problema de otimização híbrido (discreto/contínuo) que contém o fenômeno de mudança de fase. O algoritmo desenvolvido detecta a ativação e a desativação das restrições durante a solução do Problema de Valor Inicial (PVI) e resolve as EADs de índice superior resultante e as equações de sensibilidade usando o método das Derivadas Mudadas. Este método trabalha com a substituição de algumas (ou todas) as derivadas temporais por variáveis algébricas mudadas, removendo efetivamente estas

derivadas da discretização no tempo e resultando em um sistema completamente determinado. Diferente do método de eliminação, que elimina algumas variáveis da EAD original usando restrições extras do sistema estendido de EAD, o método da derivada muda adiciona variáveis de forma que o sistema estendido inteiro pode ser resolvido. A principal vantagem do algoritmo é que não requer substituições computacionais algébricas custosas. A chave do método é escolher um conjunto de derivadas no tempo para serem substituídas pelas variáveis algébricas mudas. Este método está descrito em detalhes em Mattsson e Söderlind (1993).

2.3.2. Métodos Indiretos

Os métodos indiretos surgiram com o desenvolvimento do Cálculo Variacional, permitindo a dedução das condições necessárias e suficientes para a solução de problemas de otimização dinâmica (BRYSON e HO, 1975). Os trabalhos de Bryson e Ho (1975), Lynn *et al.* (1970), Lynn e Zahradnik (1987), aplicaram o princípio de Pontryagin com a geração das equações diferenciais adjuntas e a condição necessária para a minimização da função Hamiltoniano, transformando o problema original em um problema de valor no contorno em dois pontos (TPBV). Estes TPBV podem ser resolvidos por métodos de discretização como colocação em elementos finitos e diferenças finitas, *single* e *multiple shooting*.

Atualmente, os métodos indiretos podem ser utilizados de modo eficiente devido ao desenvolvimento dos programas de álgebra computacional, que permite a obtenção automática das equações diferenciais adjuntas e demais condições de otimalidade. Desta forma, podem ser obtidas soluções altamente precisas e testes feitos *a posteriori* podem excluir as soluções sub-ótimas (CHUDEJ; GÜNTHER, 1999).

As condições necessárias de otimalidade para problemas nos quais o sistema dinâmico é descrito somente através de equações diferenciais ordinárias são bem estabelecidas na literatura (BRYSON e HO, 1975). As condições generalizadas para sistemas descritos por EADs, conforme demonstrado por Renfro (1986) e Feehery (1998) foram apresentadas na Seção 2.1. Os Métodos Indiretos têm uma faixa de convergência restrita e apresentam dificuldades de convergência, apesar de garantir o atendimento às restrições do problema. Um código que aborda o Método Indireto é o COLDAE (ASCHER e SPITERI, 1994, 1995) que é aplicado a EADs de valor de contorno não lineares semiexplícitas de índice no máximo dois e totalmente implícitos de índice um. A COLDAE é uma subrotina geral para a solução de EDOs de valor no contorno. O método implementado é a colocação polinomial por partes em pontos gaussianos, acoplado a um método de projeção de Ascher-Petzold.

Lynn *et al.* (1970) e Lynn e Zahradnik (1987) aplicaram o Princípio do Máximo de Pontryagin (PMP) com a geração das equações adjuntas e da condição necessária para a minimização da função Hamiltoniano. No primeiro trabalho, o problema de valor no contorno puramente diferencial, resultante da otimização da conversão de reações consecutivas em um reator tubular com dispersão axial, foi resolvido por um método de resíduos ponderados. Esta técnica, batizada como aproximação da trajetória para controle quase ótimo, foi estendida para sistemas distribuídos representados por equações diferenciais parciais hiperbólicas de primeira ordem no segundo trabalho.

San e Stephanopoulos (1984) estudaram a cinética de crescimento da biomassa e a estratégia de alimentação para a otimização da biomassa final produzida em um reator batelada. Para esse caso particular a ativação dos arcos singulares foi detectada, determinando assim as condições ao longo e na trajetória final do arco singular. Os mesmos autores mostraram que a escolha da variável de controle é de fundamental importância para garantir a otimalidade e a viabilidade da implementação. Eles encontraram soluções sub-ótimas para a operação do reator com taxa de alimentação como uma variável de controle e concentração de substrato fixa devido à inabilidade do controlador manter baixa concentração de substrato no fim da fase de produção. Por outro lado, o uso da concentração de substrato como uma variável de controle pela manipulação da concentração mostrou ser uma alternativa efetiva. Eles propuseram uma solução em dois passos, que determina primeiro a concentração ótima de substrato no fermentador e depois calcula o perfil de concentração de substrato na alimentação que resulta no perfil ótimo do fermentador.

Modak *et al.* (1986) apresentaram a formulação do problema de otimização do processo de fermentação batelada alimentada e a obtenção e aplicação das condições de ótimo, considerando que o controle singular é factível conforme as características das funções taxas específicas de crescimento celular e de formação de produto. Foram consideradas três combinações diferentes de taxas representadas por funções não monotônicas que exibem máximos. No tipo mais comum, o crescimento celular não sofre inibição ou repressão e tem o comportamento expresso pela Equação de Monod enquanto a formação de produto sofre inibição. Em todos os casos, considerou-se que a vazão da corrente alimentada pode alcançar o seu valor máximo, mínimo ou singular de modo a permitir inicialmente o crescimento celular e na sequência fazer com que as células produzam o produto desejado de forma ótima. Além da dependência das funções das taxas, as sequências ótimas são influenciadas pelas condições iniciais associadas. Uma vez identificadas as sequências, o problema

de otimização é reduzido a um problema de determinações dos eventos, do tempo final e da taxa de alimentação singular.

Gomes (2000) estudou a abordagem algébrico-diferencial na solução de Problemas de Controle Ótimo através do método indireto, utilizando o código COLDAE, e propôs um código que gera as equações necessárias para o ótimo a partir da aplicação o PMP.

2.3.3. Métodos Mistos ou Híbridos

Os Métodos Mistos ou Híbridos são uma combinação de métodos diretos e métodos indiretos. Nesse método, os Métodos Diretos são aplicados a problemas mais simplificados e os resultados servem de estimativas para os Métodos Indiretos, com refinamento da solução.

Stryk e Schlemmer (1994) resolveram um problema de minimização de energia e tempo de um robô industrial utilizando uma combinação entre o método direto e o indireto. O método direto é aplicado com estimativas iniciais sub-ótimas da solução $x(t)$, $u(t)$. A solução sub-ótima fornece estimativas confiáveis das variáveis de estado e variáveis adjuntas e da função identificadora de fases das restrições no estado e no controle. Com essas estimativas, o método *multi-shooting* é aplicado para um problema de valor no contorno em múltiplos pontos resultante das condições necessárias para a otimalidade.

Chudej e Günther (1999) desenvolveram uma abordagem baseada no espaço de estados, que transforma o Problema de Controle Ótimo com restrições nos estados em um com restrições no controle, aplicando-a na solução de um problema de otimização da trajetória de um avião supersônico em um plano vertical sujeito a restrições, que possui quatro variáveis de estado e duas variáveis de controle. Desta forma, o sistema de EADs de valor no contorno de índice superior é transformado em um sistema de EDOs de valor no contorno com atendimento automático das restrições no estado através da eliminação de um dos componentes do vetor de estados no arco do contorno através da utilização da restrição no estado, levando a uma manipulação analítica considerável das equações. A partir de uma Função Identificadora de Fase pré-definida, os autores formulam um Problema de Controle Ótimo substituto sujeito a condições definidas em pontos interiores e nos contornos, para cada uma das fases identificadas pelo sinal da restrição de estado. O Problema de Controle Ótimo substituto é resolvido através de um método híbrido onde estimativas iniciais dos estados e das variáveis adjuntas obtidas através do código DIRCOL, são utilizadas no algoritmo de *multi-shooting* MUMUS.

Oberle e Sothmann (1999) resolveram um Problema de Controle Ótimo de tempo final livre, relativo a um processo de fermentação batelada alimentada que representa a biossíntese de penicilina, utilizando parametrização na variável de controle e solução do NLP por um método SQP padrão, no qual admite-se a continuidade do controle. Aplicando a teoria de controle ótimo e resolvendo o Problema de Valor no Contorno resultante associado à função identificadora de fase (*switching function*) por técnicas de *multiple-shooting* associadas à relaxação dos parâmetros característicos das equações de taxa e métodos de continuação, os autores verificaram que o problema resolvido pelo método indireto satisfaz a todas as condições necessárias de primeira e segunda ordens estabelecidas pela teoria, apresentando uma solução similar à obtida pela abordagem direta mas com pequenos sub-arcos *bang-bang* no controle.

Lobato (2004) resolveu Problemas de Controle Ótimo inicialmente pelo DIRCOL, buscando a melhor solução possível fornecida pelo código, que fornece também a estimativa dos Eventos e do perfil das variáveis adjuntas. Com a estimativa dos Eventos e análise dos resultados obtidos, são construídas as Funções Identificadoras de Fases. Os Sistemas Aumentados obtidos simbolicamente, relativos a cada fase e aos quais foi aplicado o Método da Variável de Folga, no caso da presença de restrições de desigualdade, são então caracterizados pelos códigos estruturais e as reduções de índices por eles indicadas são executadas simbolicamente. Os problemas de valor no contorno de índice 1, referentes a cada fase, são resolvidos sequencialmente pelo código COLDAE. Neste trabalho, não é utilizada a formulação multifásica como entrada do código DIRCOL, ou seja, o problema é resolvido com apenas uma fase. O autor demonstra que este método possui aplicabilidade a problemas com restrições nas variáveis de estado e com controle linear nas restrições, que provocam flutuações no índice do Problema de Controle Ótimo Algébrico-Diferencial.

2.4. Métodos de Solução Analítica

Os Métodos Diretos e Indiretos não possuem informação alguma sobre a trajetória do vetor de variáveis de controle. Por essa razão, infere-se um caminho viável (ou não) para que a otimização possa ser realizada. Desta forma, se for possível conhecer antecipadamente qual seria o comportamento da variável controlada, poderíamos diminuir os esforços em encontrar por otimização este trajeto, por reduzir a quantidade de variáveis a serem otimizadas. Srinivasan *et al.* (2003), além de

referenciar os métodos Diretos e Indiretos aplicou uma abordagem analítica para a solução do problema de otimização dinâmica.

Uma solução analítica completa para o problema de otimização não é possível exceto para casos muito simples. No entanto, expressões analíticas podem ser computadas por partes da solução ótima, que podem ser usados em ordem para: 1) entender os tipos de arcos singulares que podem constituir a solução, e; 2) aumentar a eficiência do algoritmo de otimização numérica, uma vez que através deste podemos conhecer de antemão a trajetória da variável de controle.

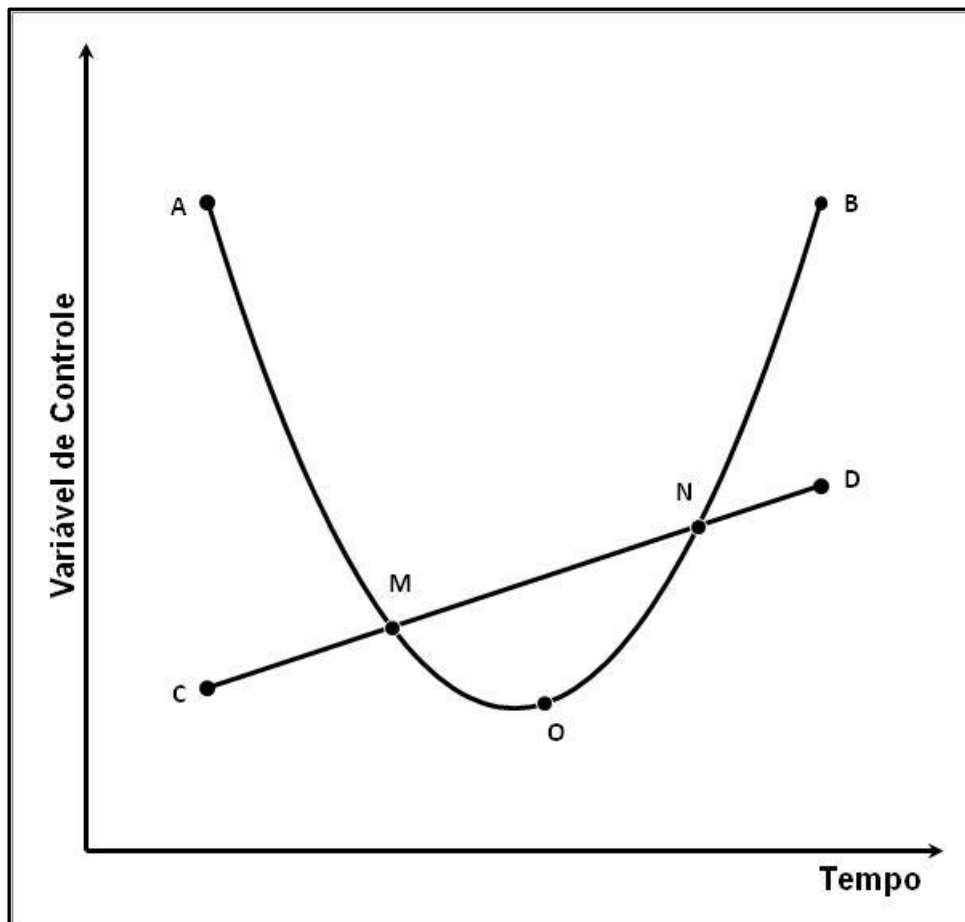


Figura 2.3: Perfis da Variável de Controle: AMONB – restrição de trajetória de valor máximo da variável de controle; CMND – trajetória ótima; CMOND – trajetória ótima com restrição

Em problemas de otimização dinâmica, os valores ótimos das variáveis manipuladas são também determinados pelas restrições do problema ou pela função objetivo característica do sistema. Então, existem intervalos específicos de tempo em que as entradas são determinadas pelas restrições de trajetória (*path constraints*) e outros intervalos onde elas estão no interior da região ótima (Figura 2.3). O tempo em que ocorrem mudanças nas entradas de um intervalo para outro é chamado de tempo

de chaveamento. Assim, a solução ótima é observada para controlar as seguintes propriedades:

- As entradas podem ser descontínuas e ainda assim as entradas são analíticas entre as descontinuidades (BRYSON e HO, 1975).
- Dois tipos de intervalos são possíveis entre instantes de chaveamento dependendo ou não se a solução é determinada pelas restrições de trajetória ativas com expressões analíticas para as entradas podendo ser obtidas para cada tipo de intervalos.

2.4.1. Conjunto de expressões analíticas para as entradas ótimas

Expressões analíticas para as entradas podem ser obtidas a partir da condição necessária de otimalidade baseada no Princípio Máximo de Pontryagin (PONTRYAGIN *et al.*, 1963). Os resultados apresentados aqui se estendem aqueles produzidos em Palanki *et al.* (1993, 1994) e Rahman e Palanki (1996) para entradas únicas de sistema de controle finito. Para um problema de otimização, a seguinte formulação é proposta (Srinivasan *et al.*, 2003):

$$\min_{\mathbf{u}(t)} J = \phi(\mathbf{x}(t_f)) \quad 2.46$$

sujeito a:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{u}), \quad \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0 \quad 2.47$$

$$\mathbf{S}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \leq 0, \quad \mathbf{T}(\mathbf{x}(t_f)) \leq 0 \quad 2.48$$

onde J é o índice de performance escalar a ser minimizado; \mathbf{x} é o vetor das n -variáveis de estado que se conhece as condições iniciais \mathbf{x}_0 ; \mathbf{u} é o vetor das m -variáveis de entrada; \mathbf{S} , o vetor das ζ -restrições de trajetória; \mathbf{T} , o vetor das τ -restrições terminais; \mathbf{F} é um vetor de funções; ϕ , uma função escalar que representa o custo terminal; e t_f o tempo final.

Para o sistema representado pelas Equações 2.46 a 2.48, considere a condição necessária de otimalidade para a entrada u_i :

$$H_{u_i} = \frac{\partial H_u}{\partial u_i} = \boldsymbol{\lambda}^T \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial u_i} + \boldsymbol{\mu}^T \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial u_i} = \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{F}_{u_i} + \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{S}_{u_i} = 0 \quad 2.49$$

H_{u_i} tem duas partes, $\boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{F}_{u_i}$ parte dependente do sistema e $\boldsymbol{\mu}^T \mathbf{S}_{u_i}$ parte dependente das restrições. Quando $\boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{F}_{u_i} \neq 0$ em um certo intervalo, então a Equação 2.49 exige que $\boldsymbol{\mu} \neq 0$ naquele intervalo. Então, uma restrição dinâmica (ou de trajetória) está ativa, e a entrada u_i pode ser inferida a partir da restrição ativa.

Por exemplo, quando somente os limites da entrada u_i são considerados, $u_i - u_{i,max} \leq 0$ e $u_{i,min} - u_i \leq 0$, então posto que $\boldsymbol{\mu} \geq 0$:

$$u_i = \begin{cases} u_{i,max} & \text{se } \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{F}_{u_i} > 0 \\ ? & \text{se } \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{F}_{u_i} = 0 \\ u_{i,min} & \text{se } \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{F}_{u_i} < 0 \end{cases} \quad 2.50$$

Sendo assim, para o caso $\boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{F}_{u_i} = 0$, é possível obter u_i como uma função de \mathbf{x} e $\boldsymbol{\lambda}$ a partir desta condição.

Entretanto, isto deve também acontecer se $\boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{F}_{u_i}$ é independente de u_i como é o caso de sistemas de controle afins (*control-affine*), $\mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}) + \mathbf{G}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}$, onde $\mathbf{F}_{u_i} = \mathbf{G}_i(\mathbf{x})$ é independente de \mathbf{u} .

Diferenciação de H_{u_i}

Quando $\boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{F}_{u_i} = 0$ e u_i não pode ser obtido diretamente desta condição, a seguinte idéia é utilizada: Desde que $H_{u_i} = 0$ para todo t , a derivada no tempo $\frac{d^j}{dt^j} H_{u_i} = 0, \forall j \geq 0$. Diferenciando a Equação 2.49 uma vez em relação ao tempo:

$$\frac{dH_{u_i}}{dt} = \dot{\boldsymbol{\lambda}}^T \mathbf{F}_{u_i} + \boldsymbol{\lambda}^T \left(\frac{\partial \mathbf{F}_{u_i}}{\partial \mathbf{x}} \dot{\mathbf{x}} + \frac{\partial \mathbf{F}_{u_i}}{\partial \mathbf{u}} \dot{\mathbf{u}} \right) + \sum_{j=1}^{\zeta} \left(\dot{\mu}_j \frac{\partial S_j}{\partial u_i} + \mu_j \frac{d}{dt} \frac{\partial S_j}{\partial u_i} \right) \quad 2.51$$

O somatório na Equação 2.51 é oriundo das restrições de trajetória e é igual a zero como demonstrado a seguir. A partir de 2.49 e $\boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{F}_{u_i} = 0, \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{S}_{u_i} = 0$ durante o intervalo que nos leva a duas possibilidades (Srinivasan *et al.*, 2003):

(1) a restrição $S_j(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ não está ativa e $\mu_j = 0$; além disso $\dot{\mu}_j = 0$ desde que $\mu_j = 0$ no final de um intervalo, e então os dois termos do somatório são zero;

(2) $S_j(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ está ativa. Isto implica em $\mu_j \neq 0$ mas $\frac{\partial S_j}{\partial u_i} = 0$ para satisfazer

$\boldsymbol{\mu}^T \mathbf{S}_{u_i} = 0$. Também, $\frac{d}{dt} \frac{\partial S_j}{\partial u_i} = 0$ desde que $\frac{\partial S_j}{\partial u_i} = 0$ no final do intervalo, e então os dois termos do somatório são zero.

Desta forma, o somatório da Equação 2.51 pode ser cortado. Usando as Equações 2.23 – 2.26 para $\dot{\mathbf{x}}$ e $\dot{\boldsymbol{\lambda}}$ temos:

$$\frac{dH_{u_i}}{dt} = \boldsymbol{\lambda}^T \left(\frac{\partial \mathbf{F}_{u_i}}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{F} - \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{F}_{u_i} + \frac{\partial \mathbf{F}_{u_i}}{\partial \mathbf{u}} \dot{\mathbf{u}} \right) - \boldsymbol{\mu}^T \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{F}_{u_i} \quad 2.52$$

$$\frac{dH_{u_i}}{dt} = \boldsymbol{\lambda}^T \Delta \mathbf{F}_{u_i} - \boldsymbol{\mu}^T \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{F}_{u_i} \quad 2.53$$

onde o operador Δ é dado por:

$$\Delta \mathbf{v} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{F} - \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{v} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{u}^{(k)}} \mathbf{u}^{(k+1)} \quad 2.54$$

Com $\mathbf{u}^{(k)}$ representando o k -ésima diferenciação no tempo de \mathbf{u} . O somatório é introduzido em 2.54 desde que, em geral, \mathbf{v} não é somente uma função de \mathbf{u} , mas também de suas derivadas no tempo. O operador Δ representa uma diferenciação no tempo de uma função vetorial \mathbf{v} ao longo das trajetórias do sistema dinâmico e é estudado na literatura de sistemas usando ferramentas de álgebra de Lie.

Continuando em um modo similar, pode ser mostrado que as sucessivas derivadas no tempo de H_{u_i} são dadas por:

$$\frac{d^j H_{u_i}}{dt^j} = \boldsymbol{\lambda}^T \Delta^j \mathbf{F}_{u_i} - \boldsymbol{\mu}^T \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial \mathbf{x}} \Delta^{j-1} \mathbf{F}_{u_i} = 0 \quad 2.55$$

Note que Δ é um operador linear, sendo assim $\Delta^2 \mathbf{v} = \Delta(\Delta \mathbf{v})$, e assim sucessivamente. As derivadas em relação ao tempo inerente à estrutura de H_{u_i} têm também duas partes, a parte dependente do sistema e a parte dependente das restrições. A diferenciação no tempo é repetida até que $\boldsymbol{\lambda}^T \Delta^j \mathbf{F}_{u_i} \neq 0$ ou u_i apareça explicitamente em $\Delta^j \mathbf{F}_{u_i}$. Segundo Srinivasan *et al.* (2003), esta diferenciação dá origem a duas soluções intrinsecamente diferentes que são discutidas abaixo:

- 1) **Restrições de trajetória ativa:** se $\boldsymbol{\lambda}^T \Delta^{\zeta_i} \mathbf{F}_{u_i} \neq 0$ depois da ζ_i -ésima diferenciação no tempo de H_{u_i} , um $\boldsymbol{\mu}$ diferente de zero é requerido para satisfazer a Equação 2.55. Isto significa que pelo menos uma das restrições está ativa. Apesar de diferentes opções de $\boldsymbol{\mu}$ são possíveis para satisfazer $\frac{d^{\zeta_i}}{dt^{\zeta_i}} H_{u_i} = 0$, a não negatividade de $\boldsymbol{\mu}$ restringe esta opção. Além disso, dado que só uma das restrições estará ativa (a mais restritiva), $\boldsymbol{\mu}$ indicará a restrição de que a entrada u_i pode ser determinada. Para calcular a entrada u_i ótima, a restrição ativa tem que ser diferenciados ζ_i vezes. Isto significa que somente aquelas restrições que tem

um grau relativo ζ_i pode ser ativa. Relembrando que o grau relativo de $\mathbf{S}(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ é o número de diferenciações no tempo de $\mathbf{S}(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ que são necessárias para a entrada u_i aparecer explicitamente.

- 2) **Solução no interior da região ótima:** se $\lambda^T \Delta^{\sigma_i} \mathbf{F}_{u_i} = 0$ mas u_i aparece explicitamente em $\Delta^{\sigma_i} \mathbf{F}_{u_i}$, a entrada u_i pode ser determinada como uma função de variáveis de estados e de variáveis adjuntas a partir das condições $\lambda^T \Delta^j \mathbf{F}_{u_i} = 0$, para $j = 0, 1, \dots, \sigma_i$.

Se ρ_i é a dimensão do espaço de estados que pode ser alcançado pela manipulação de u_i . Isto significa que $(n - \rho_i)$ direções em \mathbf{x} não são afetadas pela entrada u_i e, inversamente, existem $(n - \rho_i)$ direções em que λ não afeta u_i . Também, como as variáveis adjuntas entram linearmente em $\lambda^T \Delta^j \mathbf{F}_{u_i} = 0$, $(\sigma_i + 1)$ variáveis adjuntas podem ser eliminadas. Assim, entre as n variáveis adjuntas, $(n - \rho_i)$ podem ser eliminadas devido à independência mencionada acima e a partir das $(\sigma_i + 1)$ condições de otimalidade. Desta forma, a entrada u_i ótima dependerá de $n - (n - \rho_i) - (\sigma_i + 1) = (\rho_i - \sigma_i - 1)$ variáveis adjuntas.

Assim, dependendo dos valores relativos de σ_i e ρ_i , podemos fazer a seguinte classificação:

- $\sigma_i < \rho_i - 1$: a entrada u_i ótima depende de $(\rho_i - \sigma_i - 1)$ variáveis adjuntas, para o cálculo das equações diferenciais necessárias para ser resolvidas. Então, a retroalimentação é dinâmica por natureza.
- $\sigma_i = \rho_i - 1$: a entrada ótima é independente das variáveis adjuntas. Isto leva a uma retroalimentação estática por natureza.
- $\rho_i - 1 < \sigma_i < \infty$: corresponde ao sistema estar sobre uma superfície, onde o grau relativo da superfície em relação à u_i é igual a $(\sigma_i + 1 - \rho_i)$.
- $\sigma_i = \infty$: se $\rho_i = n$, a entrada u_i é determinada pela restrição de trajetória ativa. Se $\rho_i < n$, então, dependendo da função objetivo, a entrada u_i ótima está em uma restrição de trajetória ativa ou não é única.

Apesar de uma expressão analítica está prevista para a entrada u_i ótima, a expressão pode depender de u_j , para $j \neq i$. Assim, um conjunto de equações dinâmicas acopladas pode ter que ser resolvido a fim de determinar o vetor \mathbf{u} de entrada.

2.4.2. Cálculo da Entrada com Eliminação das Variáveis Adjuntas

Quando a entrada u_i é calculada a partir das restrições ativas ou quando ela está no interior de uma região ótima com $\sigma_i > \rho_i - 1$, a solução ótima não depende das variáveis adjuntas. Para obter a entrada ótima independentemente de λ mesmo que $\sigma_i < \rho_i - 1$, utilizamos o seguinte critério: ao invés de parar a diferenciação de H_{u_i} quando u_i aparece explicitamente em $\frac{d\sigma_i}{dt} H_{u_i}$, é continuada até a $(\rho_i - 1)$ -ésima diferenciação. Então, usando as condições $\Delta^j \mathbf{F}_{u_i} = 0$, para $j = 0, 1, \dots, \rho_i - 1$, todas as variáveis adjuntas podem ser eliminadas. Entretanto, as condições de otimalidade também dependerão das derivadas de u_i até a ordem $(\rho_i - \sigma_i - 1)$. Assim, um sistema de equações diferenciais de ordem $(\rho_i - \sigma_i - 1)$ necessita ser integrado para calcular a retroalimentação ótima e novas condições iniciais que constituem em variáveis de decisão são adicionadas ao problema de otimização (Srinivasan *et al.*, 2003).

2.4.3. Análise dos tipos de arcos singulares livres de variáveis adjuntas

Embora o conhecimento das variáveis adjuntas seja crucial para determinar se a solução está em uma restrição ativa ou no interior de uma região ótima, as entradas ótimas podem ser calculadas independentemente das variáveis adjuntas em cada intervalo. Isto nos dá a ideia de analisar o sistema de equações e as restrições de trajetória sem envolver a função objetivo ou as equações adjuntas para descobrir quais os tipos de arcos que podem existir na solução. Entretanto, esta análise é conservativa no sentido de que fornece todos os possíveis tipos de arcos que possam ocorrer ou não. Por isso, embora a análise pudesse indicar a possibilidade de ter a solução no interior da região ótima, poderia ainda acontecer que, para um dado problema de otimização, a solução estivesse sempre determinada pelas restrições de trajetória. Para Srinivasan *et al.* (2003), outra desvantagem é que a análise não fornece a sequência de arcos.

1) **Restrições de trajetória ativas:** cada restrição de trajetória $S_j(x, u)$ é diferenciada ao longo da trajetória como demonstrado abaixo:

$$\frac{dS_j}{dt} = \frac{\partial S_j}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{F} + \frac{\partial S_j}{\partial \mathbf{u}} \dot{\mathbf{u}} \quad 2.56$$

A diferenciação no tempo de $S_j(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ é continuada até a entrada u_i aparecer em $\frac{d^{\zeta_{ij}} S_j}{dt^{\zeta_{ij}}}$. Como $\zeta_{ij} = \infty$ indica que a entrada u_i não influencia a restrição S_j , u_i não pode ser determinado a partir de S_j . Por outro lado, quando $\zeta_{ij} < \infty$, a entrada u_i obtida a partir $\frac{d^{\zeta_{ij}} S_j}{dt^{\zeta_{ij}}} = 0$ constitui uma possível entrada ótima.

- 2) **Solução no interior da região ótima:** para analisar a solução na região ótima, \mathbf{F}_{u_i} é derivado ao longo das trajetórias (2.1) bem como em (2.55). Considere a Matriz:

$$\mathcal{M}_i = [\mathbf{F}_{u_i} : \Delta \mathbf{F}_{u_i} : \dots : \Delta^{\rho_i-1} \mathbf{F}_{u_i} : \dots] \quad 2.57$$

A derivação é parada quando u_i aparece explicitamente em $\Delta^{\sigma_i} \mathbf{F}_{u_i}$, mas continuada até que o *rank* estrutura de \mathcal{M}_i não aumente mais. Na verdade, ρ_i , que é a dimensão de estado espaço que pode ser alcançado pela manipulação de u_i , é o *rank* estrutural de \mathcal{M}_i .

O *rank* de \mathcal{M}_i é uma função das variáveis de estado e das entradas. A entrada u_i ótima não sendo uma restrição de trajetória ativa ou, equivalentemente, estando no interior da região ótima, corresponde ao *rank* de \mathcal{M}_i sendo menor que seu *rank* estrutural. Os quatro casos para o valor de σ_i discutidos acima podem ser revistos neste contexto. Quando $\sigma_i < \rho_i - 1$, \mathcal{M}_i perde *rank* para uma combinação específica de $\mathbf{x}, \mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \dots, \mathbf{u}^{(\rho_i-\sigma_i-1)}$, enquanto que para $\sigma_i = \rho_i - 1$, o *rank* é perdido para uma combinação específica de somente \mathbf{x} e \mathbf{u} , no entanto podemos encontrar a entrada ótima u_i através do $\det(\mathcal{M}_i) = 0$, que, como observado anteriormente, é função das derivadas subsequentes de u_i . Já no caso de $\sigma_i > \rho_i - 1$, o *rank* de \mathcal{M}_i depende somente de \mathbf{x} , e para $\sigma_i = \infty$, \mathcal{M}_i não perde *rank*.

Se $\rho_i = n$, a entrada ótima u_i é obtida da condição $\det(\mathcal{M}_i) = 0$. Se $\rho_i < n$, então, por uma apropriada transformação de estado, pode ser arranjado para que somente os primeiros ρ_i estados do sistema sejam influenciados por u_i . Em tal caso, o determinante nulo da submatriz de \mathcal{M}_i composto pelas ρ_i primeiras linhas pode ser utilizado para calcular a entrada ótima.

2.5. Equações Algébrico-Diferenciais de Índice Superior

A necessidade de resolver EADs de índice elevados em aplicações práticas na área da engenharia tem sido de certa forma controversa na literatura, visto que muitos autores (GANI e CAMERON,1992; LEFKOPOULOS e STADTHERR,1993;

MARQUARDT,1994; PONTON e GAWTHROP, 1991; UNGER *et al.*, 1995) tem defendido a reformulação de modelos matemáticos de processo para problemas de EDOs ou EADs de índice 1, justamente para evitar índices elevados em EADs.

A experiência tem provado que trabalhando diretamente com EADs é vantajoso por diversas razões (MURATA e BISCAIA, 1997; VIEIRA e BISCAIA, 2001):

- (i) As variáveis têm significado físico;
- (ii) Manipulações custosas são evitadas e informações fundamentais, que poderiam ser perdidas pela diferenciação, são preservadas;
- (iii) Relações constitutivas, tais como relações de equilíbrio de fase, equações cinéticas e isotermas de equilíbrio, são facilmente incluídas e/ou modificadas assim que for necessário.

Muitos problemas de otimização dinâmica são naturalmente formados por EADs, que por sua vez muitas vezes são de índice elevado, pois surgem quando o número de variáveis de estado independentes é menor do que o número de variáveis que tem derivadas no tempo aparecendo na EAD, ou seja, quando existem relações algébricas explícitas e/ou implícitas entre as variáveis de estado. Em geral, EADs de índice superior podem resultar de diversas fontes. Elas podem surgir de especificações de variáveis de estado, ou restrições impostas nestas variáveis, para determinação das variáveis de entrada. Muitas EADs de índice elevados em engenharia química resultam de um estado pseudo-permanente, equilíbrio ou hipóteses de incompressibilidade (GANI e CAMERON, 1992; LEFKOPOULOS e STADTHERR, 1993; PANTELIDES,1988; PONTON e GAWTHROP, 1991).

Uma das primeiras alternativas promissoras para a resolução de problemas de índice variável, proposto por Feehery (1998), envolve um conjunto de ferramentas computacionais para:

- (i) detecção da ativação e desativação das restrições;
- (ii) identificação automática da variação do índice diferencial ao longo da simulação;
- (iii) geração, por diferenciação automática, das equações de sensibilidade; e
- (iv) reinicialização do sistema após a detecção.

Porém, cada uma das ferramentas apresentadas pode requerer um maior esforço computacional. Feehery (1998) também demonstrou que para resolver problemas de otimização dinâmica eficientemente utilizando o método de parametrização da variável de controle exige-se um método direto para a solução de índices elevados.

Apesar dos argumentos apresentados por Feehery e Barton (1998) em favor da sua metodologia, convém enfatizar que não há uma unanimidade na literatura (SCHLEGEL *et al.*, 2005, SRINIVASAN *et al.* 2003) sobre qual a melhor abordagem para tratar as restrições de desigualdades presentes no problema de otimização dinâmica, sobretudo quando estas resultem em um problema de índice variável (SOUZA, 2007).

Outra abordagem algébrico-diferencial da solução de Problemas de Controle Ótimo sujeitos a restrições de desigualdade foi desenvolvida por Pfeifer (2007). Nesta abordagem o sistema de equações algébrico-diferencial foi associado com a técnica de parametrização dos instantes em que ocorrem a ativação e a desativação das restrições ao longo da trajetória desenvolvida originalmente para Problemas Chaveados, com o objetivo de estimá-los utilizando o Método Indireto de solução. Para isto, foi utilizada a determinação de Funções Identificadoras de Fase que expressam a variável de controle analiticamente em cada fase, baseadas na condição de otimalidade e na análise física do problema para distinguir sequencias apropriadas de ativação/desativação das restrições, que causam flutuações no índice diferencial das equações.

Ainda em 2007, Souza reescreveu o problema de otimização reduzindo o esforço computacional, tanto nas etapas de integração como para a otimização. O esforço computacional requerido para outros algoritmos, que pode ser atribuído às estratégias de busca e localização das descontinuidades e aos procedimentos de reinicialização da integração, motivou a concepção de uma nova abordagem para manipulação de descontinuidades, que podem surgir da violação de restrições de desigualdades originárias: da própria formulação do modelo matemático e, de problemas de otimização (estacionária ou dinâmica), onde tais restrições são inerentes. O foco desta classe de problemas é o tratamento das descontinuidades que ocorrem na forma implícita (ou seja, quando o tempo da violação das restrições de desigualdade só é conhecido depois que determinadas condições são satisfeitas). A essência dessa abordagem é a caracterização das inequações através de funções de regularização (VIEIRA e BISCAIA JR., 2001), permitindo comutação automática entre equações. Os resultados obtidos ilustraram a facilidade de implementação da nova estratégia que se mostrou eficiente na manipulação de disjunções, sejam elas explícitas ou implícitas.

Na resolução de problemas de otimização dinâmica com restrições de igualdade (neste caso, os problemas de controle ótimo singular são considerados como problemas de otimização dinâmica com restrições de igualdade) e desigualdade

aplica-se, após a identificação do índice diferencial do correspondente sistema algébrico-diferencial, uma técnica apropriada para integração numérica, caso o sistema apresente um índice menor ou igual a 1. Para a resolução numérica de sistemas de índice superior, as estratégias adotadas consistem em: (i) reduzir o índice do sistema para 1 ou 0 ou, (ii) utilizar um código adequado para sistemas de índice superior.

2.6. Funções de Regularização na Manipulação de Descontinuidades

Em seu trabalho, Vieira (2001) sugere a utilização de funções de regularização na transposição de descontinuidades que são inerentes do sistema dinâmico. Souza (2007), seguindo a sugestão de Vieira, avaliou a potencialidade das funções de regularização na integração de modelos dinâmicos com descontinuidades. A essência de sua abordagem é a caracterização das inequações através de funções de regularização, permitindo automatizar a comutação entre equações, dispensando a determinação de novas condições iniciais consistentes. Nesta nova formulação, a restrição, matematicamente representada pela Equação (2.58), é agora representada por uma única equação algébrica (Equação 2.59) que representa a soma ponderada das duas funções que caracterizam a descontinuidade:

$$y = \begin{cases} g_1(x, t) & \text{se } f(x, t) < f_{max} \\ g_2(x, t) & \text{se } f(x, t) \geq f_{max} \end{cases} \quad 2.58$$

$$y = [1 - \eta(f - f_{max}, \xi)] \cdot g_1(x, t) + \eta(f - f_{max}, \xi) \cdot g_2(x, t) \quad 2.59$$

onde: ξ é um parâmetro definido pelo usuário (normalmente $0 < \xi \ll 1$) e a função de regularização, $\eta(f - f_{max}, \xi)$, apresenta a seguinte propriedade:

$$\eta(arg, \xi) \cong \begin{cases} 0, & \text{se } arg < 0 \\ 1, & \text{se } arg \geq 0 \end{cases} \quad 2.60$$

Cabe ressaltar que a escolha da função de regularização deve-se apenas à facilidade e generalidade desta equação no tratamento das mais diversas formas funcionais de disjunção.

2.6.1. Reinicialização e Chaveamento entre Modelos

Durante a resolução de problemas de controle ótimo singular e nos problemas de otimização dinâmica com restrições, o índice do sistema pode variar ao longo da trajetória ótima. Usualmente, a resolução destes problemas envolve etapas de

identificação do ponto onde ocorre a descontinuidade (no caso, a variação do índice) e, em seguida, a passagem para o novo sistema (chaveamento entre modelos). Como podem ocorrer descontinuidades em algumas das variáveis, o novo sistema nem sempre pode ser integrado utilizando como condições iniciais da nova etapa as condições finais da etapa anterior (sistema antigo). Para superar tal dificuldade, é necessário algum procedimento para cômputo das novas condições iniciais consistentes.

Para ilustrar este comportamento, considere a otimização do seguinte sistema dinâmico (diferencial ou algébrico-diferencial) com dimensão n , representado pelas Equações (2.61) e (2.62) e contendo apenas uma variável de controle e uma restrição (neste caso, função das variáveis diferenciais e algébricas do modelo dinâmico):

$$f(\dot{x}, x, y, u) = 0 \quad 2.61$$

$$g(x, y) \leq 0 \quad 2.62$$

No procedimento de otimização e, enquanto a restrição está inativa, o comportamento do modelo é influenciado apenas pela ação da variável de controle, u_c , que é a variável de decisão do otimizador. Esta ação é descontinuada quando a restrição de desigualdade torna-se ativa. O efeito descrito pode ser representado matematicamente pelas Equações (2.63) a (2.65).

$$f(\dot{x}, x, y, u) = 0 \quad 2.63$$

$$g(x, y) = \begin{cases} g(x, y), & \text{se } g(x, y) < 0 \\ 0, & \text{se } g(x, y) \geq 0 \end{cases} \quad 2.64$$

$$u = \begin{cases} u_c, & \text{se } g(x, y) < 0 \\ u, & \text{se } g(x, y) \geq 0 \end{cases} \quad 2.65$$

O novo sistema de EADs formado pelas Equações (2.63) a (2.65) é definido como sistema disjuntivo, com base no fato de que apenas uma ou outra destas restrições pode estar ativa.

A ponderação é feita através de um peso que varia ao longo do processo de integração, assumindo o valor 0 se a restrição de desigualdade estiver inativa, 1 se estiver ativa e um valor intermediário ao longo da transição representado pelo peso η :

$$\eta(g(x, y), \xi) \cdot g(x, y) + [1 - \eta(g(x, y), \xi)] \cdot (u - u_c) = 0 \quad 2.66$$

Desta forma, os valores das variáveis de estado obtidos no final da integração da primeira etapa são utilizados como condições iniciais da etapa subsequente, eliminando em decorrência a etapa de determinação de novas condições iniciais para continuar a integração.

Posto isto, cabe uma comparação da técnica proposta por Souza (2007) com o trabalho de Feehery e Barton (1998): apesar de os autores apresentarem um equacionamento semelhante ao proposto por Souza, os parâmetros presentes na abordagem deles assumem apenas valores binários, traduzindo o ligar e o desligar das restrições do problema. Como ocorre uma alternância brusca entre modelos, um algoritmo de caracterização do novo sistema de EADs deve ser implementado, com as decorrentes etapas de redução de índice (PANTELIDES *et al.*, 1988) e de reinicialização do sistema, o que, como visto anteriormente, não se faz necessário com a abordagem de Souza.

2.7. Abordagem Analítica com Eliminação das Variáveis Adjuntas

Um dos inconvenientes da formulação do problema de controle ótimo com base no Princípio de Máximo de Pontryagin é a geração das equações referentes às variáveis adjuntas, o que resulta em um problema de valor no contorno de difícil resolução. Uma alternativa atraente apresentada primeiramente por Vieira e Biscaia Jr. (2001) e utilizada por Souza (2007), consiste em explorar a linearidade do Hamiltoniano, quando possível, em relação à variável de controle, u , ou seja, para a classe de problemas de controle afins em u . Os autores utilizam o fato do Hamiltoniano ser linear em relação às variáveis adjuntas e à variável de controle para esta classe de problemas, ou seja:

$$H = H_0(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) + \mathbf{u} \cdot \mathbf{w}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) \quad 2.67$$

onde $\boldsymbol{\lambda}(t)$ são as variáveis adjuntas e \mathbf{x} , o vetor de variáveis de estados.

Desta forma, a expressão para o i -ésimo componente da variável de controle no arco singular (quando w_i assume valor igual à zero, pois $\frac{\partial H}{\partial u_i} = 0 = w_i(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})$) pode ser obtida através de sucessivas diferenciações da função $w_i(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})$ até que o i -ésimo componente da variável de controle apareça de forma explícita.

Segundo Souza (2007), em determinadas condições de operação, a política de adição ótima pode encontrar uma singularidade, quando não é mais possível abordar o problema pelo método convencional de controle ótimo. Esta singularidade ocorre para um valor do tempo não conhecido e o lugar geométrico em que ocorre é chamado de arco singular. Como consequência, neste modo de operação, uma nova

equação algébrica referente ao arco singular deve ser acrescentada ao sistema original, podendo resultar em uma variação do índice diferencial do sistema de equações.

2.8. Conclusões sobre o Estado da Arte da Otimização Dinâmica de Processos

Problemas de otimização dinâmica de processos usualmente são resolvidos por Métodos Simultâneos (problemas de dimensões elevadas) ou por Métodos Sequenciais (problemas de pequena escala). A literatura da Engenharia Química possui diversos trabalhos que adotam uma destas abordagens, como os trabalhos Kameswaran e Biegler (2006) e Biegler (2007), que vem optando pela discretização total (transformação total das equações diferenciais em equações algébricas), e os trabalhos de Schlegel e Marquardt (2006), Feehery e Barton (1996, 1998), que utilizam a discretização apenas das variáveis de controle associados a pacotes consagrados de NLP.

O grande mérito desta dissertação é a resolução analítica (portanto exata) do problema de otimização com a incorporação automática das restrições às variáveis de controle e/ou às variáveis de estado com o emprego de funções regularizadoras. A abordagem associa o procedimento de eliminação das variáveis adjuntas, portanto evitando a resolução de um problema de valor de contorno, com procedimentos eficientes e consagrados de resolução numérica de equações algébrico-diferenciais.

O detalhamento da implementação da metodologia proposta nesta dissertação é apresentado no próximo capítulo, que estende a abordagem de eliminação das variáveis adjuntas, acoplada ao emprego de funções regularizadoras, para diferentes tipos de controle ótimo.

CAPÍTULO III

METODOLOGIA PARA SOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE OTIMIZAÇÃO DINÂMICA

RESUMO

Em problemas de otimização dinâmica, a presença de restrições de igualdade e/ou desigualdade nas variáveis de estado podem resultar em descontinuidades ou em flutuação de índice diferencial. Neste Capítulo é apresentada a proposta de técnica de solução de problemas de otimização dinâmica usando a abordagem analítica livre das variáveis adjuntas com o uso de funções regularizadoras.

Desde os trabalhos de Bryson Jr. e Ho (1969), os problemas de otimização dinâmica com índice superior são resolvidos por técnicas rigorosas fundamentadas na teoria de controle singular ou então por técnicas de aproximação, nas quais eram utilizados algoritmos de pontos interiores associados a funções penalidade. Já com o avanço teórico e numérico da abordagem algébrico-diferencial, foi possível reinterpretar o problema de otimização dinâmica, considerando as restrições como equações adicionais do sistema dinâmico. No entanto, um aspecto ainda pouco analisado na literatura é o fato da forma funcional das restrições afetar o índice diferencial do sistema algébrico-diferencial descritivo do sistema dinâmico, podendo este índice até, existindo restrições de desigualdade como funções das variáveis de estado, variar ao longo do tempo.

Souza (2007) utilizou a parametrização da variável de controle para encontrar, no processo de otimização, os parâmetros nos quais a solução obtida fosse aproximadamente igual à trajetória ótima, que inicialmente é desconhecida. Por essa razão, foi utilizado, em seu trabalho, um sistema estendido de variáveis adjuntas para encontrar a solução do problema de otimização dinâmica.

No presente trabalho, todas as restrições de desigualdade são transformadas em restrições de igualdade pela introdução de funções contínuas apropriadas sendo então detectadas automaticamente. A abordagem utilizada segue o mesmo procedimento proposto por Souza (2007) para detecção de restrições em sistemas dinâmicos, ou seja, as restrições de desigualdade são transformadas em novas equações algébricas e o sistema de EADs resultante é integrado continuamente. Foi utilizado o código DASSLC para a resolução numérica de problemas com índice diferencial superior e variável associado a rotinas de otimização contidas no MATLAB e para as diferenciações simbólicas foi utilizado o software Maple.

A seguir serão apresentadas todas as etapas para implementar a abordagem analítica livre de variáveis adjuntas proposta para a solução do problema de otimização dinâmica.

3.1. Algoritmo para Resolução do Problema de Otimização Dinâmica com Restrições

A fim de evitar os diversos inconvenientes dos métodos de resolução apresentados no Capítulo 2, tais como parametrização da variável de controle, formulação de sistema estendido por variáveis adjuntas e reinicialização da integração quando ocorre uma descontinuidade e/ou variação de índice diferencial, neste trabalho é proposta uma abordagem generalizada que elimina estes inconvenientes,

simplificando a solução do problema, tendo como ganho um menor custo computacional, visto que o objetivo é encontrado rapidamente. O algoritmo proposto é o seguinte:

1. As equações diferenciais devem ser de primeira ordem e na forma explícita, Equação 3.1, o que pode ser feito através de mudança de variável. Caso seja possível, reduzir o modelo eliminando equações linearmente dependentes do sistema.

$$\frac{dy}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{y}, u, t) \quad 3.1$$

2. Calcular \mathbf{F}_u , através da derivada parcial de \mathbf{F} em relação à u :

$$\mathbf{F}_u = \frac{\partial}{\partial u} \mathbf{F}(\mathbf{y}, u, t) \quad 3.2$$

3. Eliminar as variáveis adjuntas: calcular $\Delta^j F_u$, $j = 1, 2, \dots, \sigma$ até encontrar u explícito, conforme Seção 2.4.1, com ρ igual ao *rank* estrutural de \mathbf{F} , calcular a trajetória ótima da variável de controle u , caso a trajetória exista:

- i. Se $\sigma = \rho - 1$, a matriz \mathcal{M} é quadrada e é dada por:

$$\mathcal{M} = [F_u : \Delta F_u : \dots : \Delta^\sigma F_u] \quad 3.3$$

A trajetória ótima de u é dado pelo $\det(\mathcal{M}) = 0$.

- ii. Se $\sigma < \rho - 1$, deve-se prosseguir o cálculo até $\Delta^{\rho-1} F_u$:

$$\mathcal{M} = [F_u : \Delta F_u : \dots : \Delta^{\rho-1} F_u] \quad 3.4$$

A trajetória ótima de u é dado pelo $\det(\mathcal{M}) = 0$, que também é função das derivadas de u de ordem $(\rho - \sigma - 1)$.

- iii. Se $\sigma > \rho - 1$ e σ é finito, a matriz \mathcal{M} é dada por:

$$\mathcal{M} = [F_u : \Delta F_u : \dots : \Delta^\sigma F_u] \quad 3.5$$

A trajetória ótima de u é dada pelo cálculo da submatriz de *rank* ρ que contenha $\Delta^\sigma F_u$.

- iv. Se $\sigma = \infty$ ou $\det(\mathcal{M}) = 0$ for independente das variáveis de estado e de controle, a trajetória viável de u é dada pela restrição.

4. Calcular a trajetória viável de u quando as restrições estão ativas, ou seja, cálculo $\frac{d^{\varsigma_{ij}} S_j}{dt^{\varsigma_{ij}}}$, conforme a Equação 2.56 e de acordo com as condições da Seção 2.4.3.
5. Estabelecer condições nas quais as restrições estejam ativas para regularizar a variável de controle.
6. Definir funções de regularização adequadas e seus parâmetros.

7. Reescrever o modelo regularizado, no qual a variável de controle deve conter a trajetória ótima e/ou restrita.
8. Caso seja necessário, reescrever a função objetivo, de acordo com a nova formulação do problema.
9. Otimizar o problema regularizado a fim de se alcançar o objetivo proposto, utilizando ferramentas de otimização adequadas.

Este procedimento é válido também para problemas com mais de uma variável de controle, podendo, neste caso, existir uma relação de dependência de uma variável de controle pela derivada de ordem $(\rho_i - \sigma_i - 1)$ de outra variável de controle.

3.2. Aplicação da Técnica Proposta

A título de ilustração, esta metodologia é aplicada no problema de maximização da produção de etanol apresentado por Hong (1986), para avaliar as propostas de resolução de sistemas de índice variável. O modelo matemático que descreve o problema é constituído pelo seguinte sistema de equações:

$$\frac{dx_1}{dt} = \mu(S, P) \cdot x_1 \quad 3.6$$

$$\frac{dx_2}{dt} = \varepsilon(S, P) \cdot x_1 \quad 3.7$$

$$\frac{dx_3}{dt} = u \quad 3.8$$

onde x_1 , x_2 e x_3 representam a massa de células, massa de produto e volume do sistema, respectivamente.

Neste problema, é considerado que as expressões para a taxa de crescimento, μ , e produção específica, ε , são funções de S (substrato) e P (concentração de produto), conforme apresentado:

$$\mu(S, P) = \frac{\mu_0 \cdot S}{\left(1 + \frac{P}{K_{1p}}\right) \cdot (K_{1s} + S)} \quad 3.9$$

$$\varepsilon(S, P) = \frac{g_0 \cdot S}{\left(1 + \frac{P}{K_{2p}}\right) \cdot (K_{2s} + S)} \quad 3.10$$

onde:

$$S = S_f + \frac{c - x_1}{Y \cdot x_3} \quad 3.11$$

$$P = \frac{x_2}{x_3} \quad 3.12$$

Assim o problema de otimização é dado por:

$$\max x_2(t_f) \quad 3.13$$

sujeito às Equações 3.6 a 3.12

O conjunto de condições iniciais e os respectivos valores das constantes utilizadas na resolução do problema são apresentados na Tabela 3.1 (HONG, 1986).

Tabela 3.1: Condições Iniciais e Constantes Utilizadas.

Variáveis	Valores
x_0	1,0 g/L
S_0	150,0 g/L
P_0	10^{-5} g/L
V_0	10,0 L
u_{sup}	12,0 L
u_{inf}	0,0 L
V_{max}	200,0 L
K_{1p}	16 g/L
K_{2p}	71,5 g/L
K_{1s}	0,22 g/L
K_{2s}	0,44 g/L
Y	0,1
μ_0	$0,408 \text{ h}^{-1}$
g_0	$1,0 \text{ h}^{-1}$
S_f	150 g/L
c	10 g
t_f	62 h

Aplicando a proposta de Vieira e Biscaia Jr (2001), utilizada também por Souza (2007), temos que a política ótima de controle pode então ser determinado aplicando o Princípio de Máximo de Pontryagin (PONTRYAGIN *et al.*, 1963), com o Hamiltoniano, H , representado pela seguinte equação:

$$H = H_0 + w \cdot u = (\lambda_1 \cdot \mu + \lambda_2 \cdot \varepsilon) \cdot x_1 + \lambda_3 \cdot u \quad 3.14$$

A condição que dá origem ao arco singular, $\frac{\partial H}{\partial u} = w = 0$, resulta na eliminação da variável adjunta λ_3 da Equação (3.14). Desta forma, quando a restrição que representa o arco singular está ativa, a ação de controle que conduz ao ótimo é aquela que maximiza o Hamiltoniano do problema definido por $H_0 = 0$ (problema de tempo final livre), ou seja:

$$(\lambda_1 \cdot \mu + \lambda_2 \cdot \varepsilon) \cdot x_1 = 0 \quad 3.15$$

Dado que a função $w(x, \lambda)$ deste exemplo e todas suas derivadas são funções lineares de λ , assim, derivando-se uma vez a Equação (3.15) em relação à x_3 a seguinte equação é obtida:

$$\left(\lambda_1 \cdot \frac{\partial \mu}{\partial x_3} + \lambda_2 \cdot \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_3} \right) \cdot x_1 = 0 \quad 3.16$$

É possível então representar as Equações (3.15) e (3.16) em termos do seguinte sistema:

$$\begin{bmatrix} \mu & \varepsilon \\ \frac{\partial \mu}{\partial x_3} & \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_3} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{bmatrix} = 0 \quad 3.17$$

Como consequência, fazendo o determinante da matriz representada pela Equação (3.17) igual a zero, obtém-se a seguinte restrição adicional:

$$V = \mu \cdot \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_3} - \varepsilon \cdot \frac{\partial \mu}{\partial x_3} = 0 \quad 3.18$$

A Equação (3.18) representa a ação de controle quando a restrição do arco singular está ativa e que constitui um sistema de índice 2. A função de regularização $\eta(V^2)$ é tal que quando V é igual a zero η é igual a 1, caso contrário η é igual a zero. A restrição regularizada é apresentada abaixo:

$$(1 - \eta(V^2)) \cdot (u - u_c) + \eta(V^2) \cdot \left(\mu \cdot \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_3} - \varepsilon \cdot \frac{\partial \mu}{\partial x_3} \right) = 0 \quad 3.19$$

Para a metodologia de Souza (2007) são obtidos os seguintes resultados:

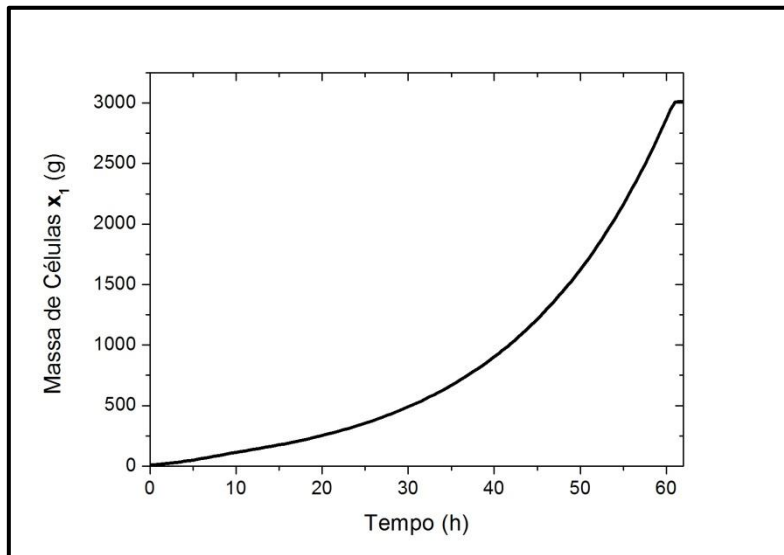


Figura 3.1: Resultados Obtidos para Massa de Células.

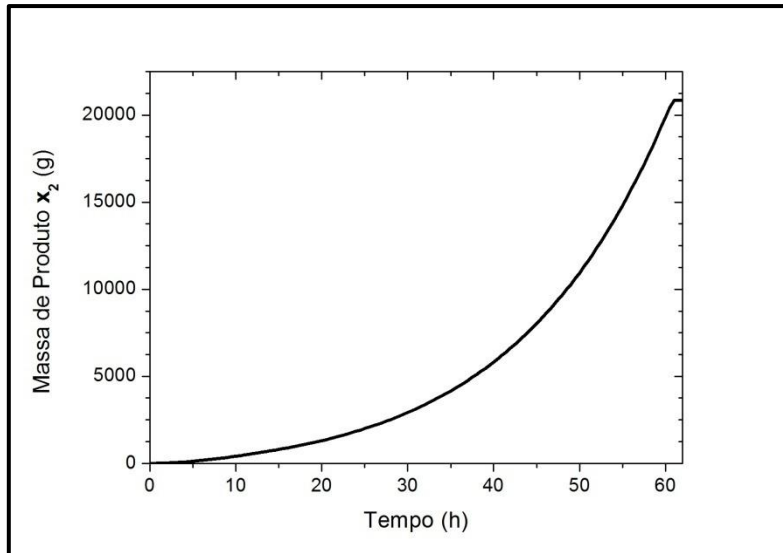


Figura 3.2: Resultados Obtidos para Massa de Produto.

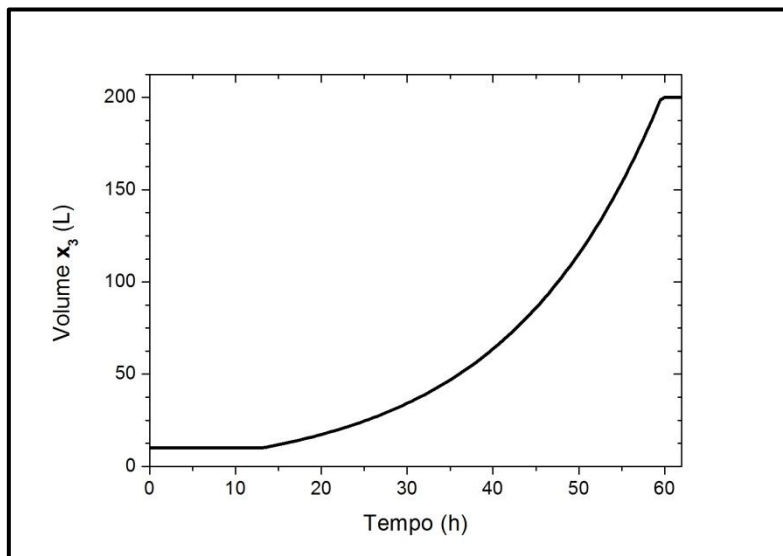


Figura 3.3: Variação do Volume do Biorreator com o Tempo.

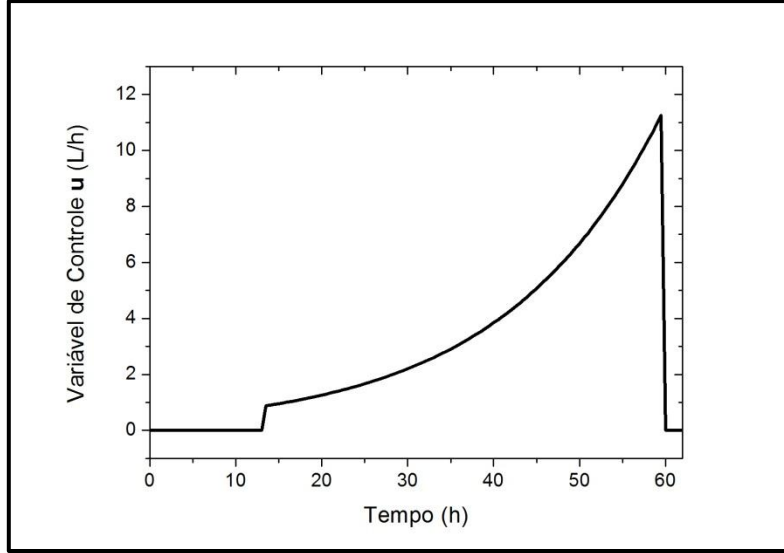


Figura 3.4: Perfil da Variação da Vazão Controlada do Biorreator.

A utilização de funções de regularização neste exemplo facilitou a resolução do problema. As dificuldades inerentes à solução do problema de índice variável foram superadas sem a necessidade de manipulações excessivas, como as apresentadas na literatura. Neste problema, em especial, apenas uma variável de controle foi utilizada. Segundo Souza (2007), o ferramental numérico pode ser estendido a múltiplas variáveis de controle.

Para o mesmo problema iremos aplicar a metodologia proposta nesta dissertação, baseando-se na condição de otimalidade para uma solução analítica apresentada na Seção 2.4. Desta forma, podemos chegar à trajetória ótima da entrada u utilizando outra abordagem. Considerando o mesmo modelo dinâmico dado pelas Equações (3.6) a (3.8), obtemos a matriz \mathcal{M} através das Equações (2.54), (2.55) e (2.57):

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \mu(S, P) \cdot x_1 \\ \varepsilon(S, P) \cdot x_1 \\ u \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F}_u = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \Delta \mathbf{F}_u = \begin{bmatrix} -\frac{\partial \mu}{\partial x_3} \cdot x_1 \\ \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_3} \cdot x_1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad 3.20$$

$$\Delta^2 \mathbf{F}_u = \begin{bmatrix} -x_1 \left(\left(\mu \frac{\partial^2 \mu}{\partial x_1 \partial x_3} + \varepsilon \frac{\partial^2 \mu}{\partial x_2 \partial x_3} - \frac{\partial \mu}{\partial x_1} \cdot \frac{\partial \mu}{\partial x_3} - \frac{\partial \mu}{\partial x_2} \cdot \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_3} \right) \cdot x_1 + \frac{\partial^2 \mu}{\partial x_3^2} \cdot u \right) \\ -x_1 \left(\mu \cdot \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_3} - \varepsilon \frac{\partial \mu}{\partial x_3} + \left(\mu \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial x_1 \partial x_3} + \varepsilon \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial x_2 \partial x_3} - \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_1} \cdot \frac{\partial \mu}{\partial x_3} - \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_2} \cdot \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_3} \right) \cdot x_1 + \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial x_3^2} \cdot u \right) \\ 0 \end{bmatrix} \quad 3.21$$

$$\mathcal{M} = [\mathbf{F}_u \quad \Delta \mathbf{F}_u \quad \Delta^2 \mathbf{F}_u] \quad 3.22$$

A matriz \mathcal{M} tem posto estrutural igual a 3, mas o posto depende das variáveis de estado. Utilizando $\det(\mathcal{M}) = 0$ chega-se à trajetória ótima da variável de controle

$u_{\acute{o}timo}$:

$$u_{\acute{o}timo} = \left(\mu \left[\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_3} \frac{\partial^2 \mu}{\partial x_1 \partial x_3} - \frac{\partial \mu}{\partial x_3} \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial x_1 \partial x_3} \right] x_1 + \varepsilon \left[\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_3} \frac{\partial^2 \mu}{\partial x_2 \partial x_3} - \frac{\partial \mu}{\partial x_3} \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial x_2 \partial x_3} \right] x_1 \right. \\ \left. - \left[\frac{\partial \mu}{\partial x_1} \frac{\partial \mu}{\partial x_3} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_3} - \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_1} \left(\frac{\partial \mu}{\partial x_3} \right)^2 - \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_2} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_3} \frac{\partial \mu}{\partial x_3} + \frac{\partial \mu}{\partial x_2} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_3} \right)^2 \right] x_1 \right. \\ \left. - \mu \frac{\partial \mu}{\partial x_3} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_3} + \varepsilon \left(\frac{\partial \mu}{\partial x_3} \right)^2 \right) / \left[\frac{\partial \mu}{\partial x_3} \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial x_3^2} - \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_3} \frac{\partial^2 \mu}{\partial x_3^2} \right] \quad 3.23$$

A variável de controle regularizada, similar à aplicação de Souza (2007) anterior, segue abaixo:

$$(1 - \eta(V^2)) \cdot (u - u_c) + \eta(V^2) \cdot (u - u_{\acute{o}timo}) = 0 \quad 3.24$$

Para esta nova abordagem do problema do biorreator, obtemos os resultados apresentados abaixo:

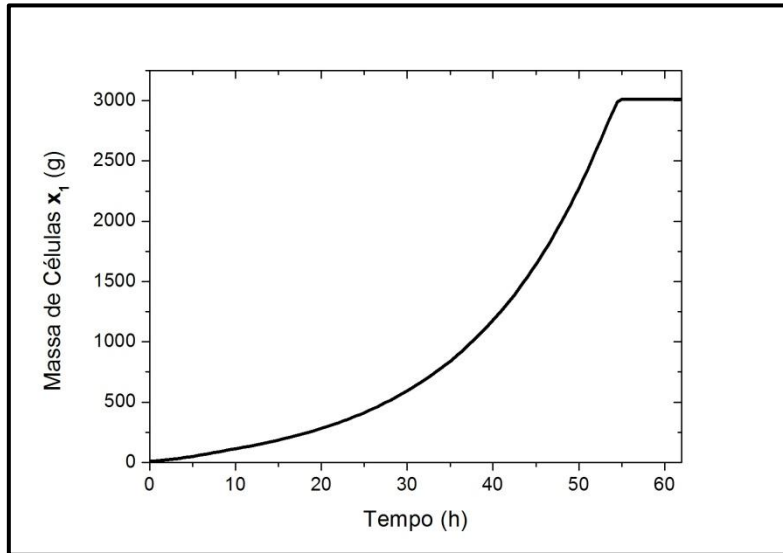


Figura 3.5: Resultados Obtidos para Massa de Células.

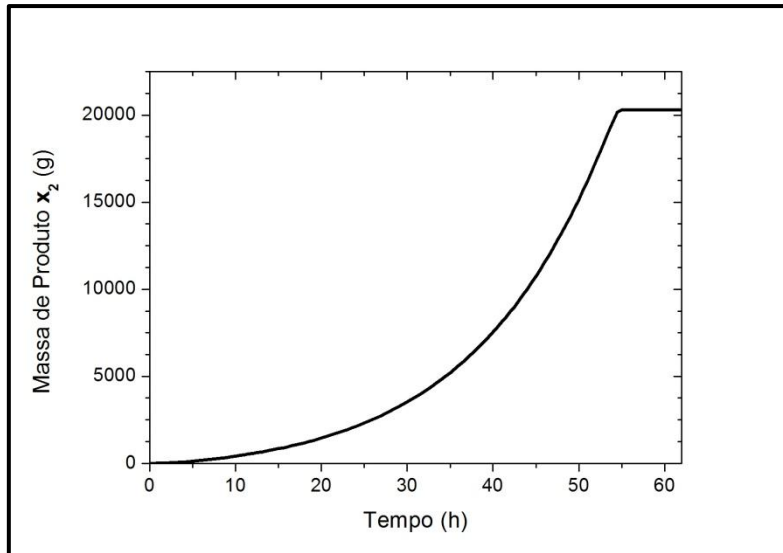


Figura 3.6: Resultados Obtidos para Massa de Produto.

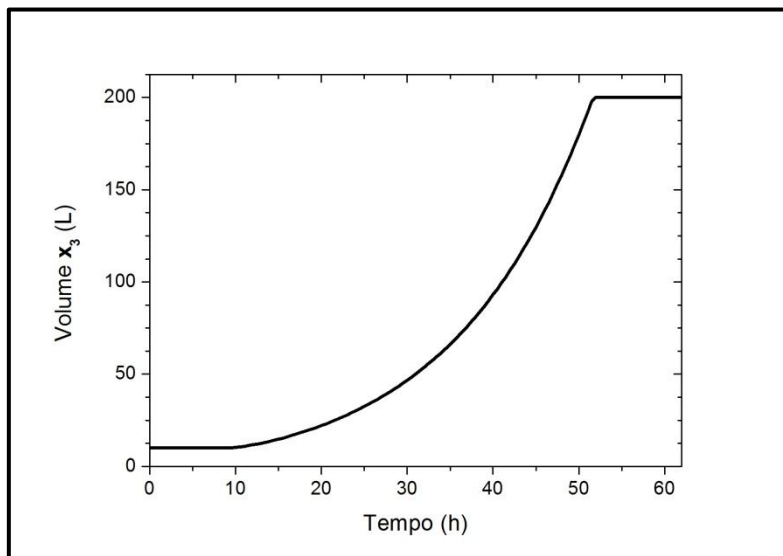


Figura 3.7: Variação do Volume do Biorreator com o Tempo.

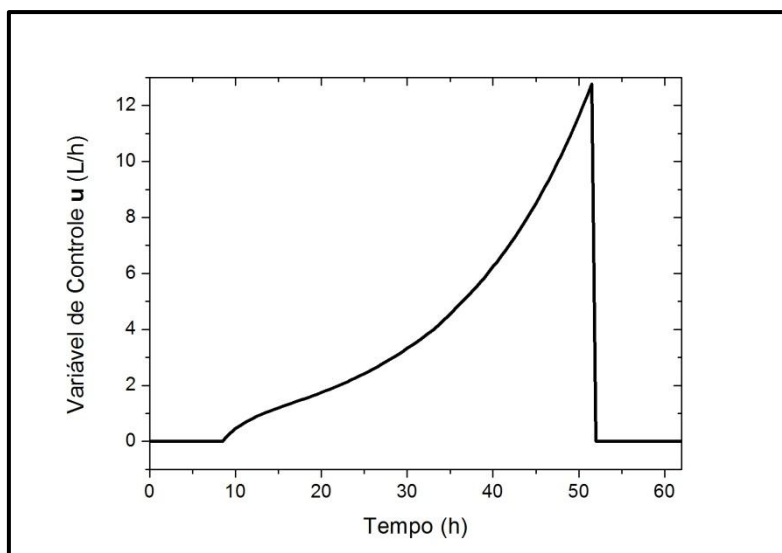


Figura 3.8: Perfil da Variação da Vazão Controlada do Biorreator.

Podemos perceber claramente que na nova abordagem o volume máximo é atingido em tempo de reação menor (52 horas) do que na abordagem de Souza (2007) – 60 horas. Percebe-se, também, um comportamento similar nas duas abordagens da ação de controle quando a restrição está ativa.

3.3. Conclusões sobre a Metodologia

A metodologia proposta neste trabalho para a manipulação de restrições de igualdade e desigualdade e eliminação das variáveis adjuntas, através da determinação da trajetória ótima da variável de controle, além da implementação simples, apresenta os seguintes aspectos:

- não é necessário o ajuste dos graus de liberdade do sistema (desta forma, evita-se a etapa de partição do vetor de variáveis de controle);
- a variável de controle tem sua trajetória ótima determinada antes da solução numérica, não havendo necessidade de parametrizá-la, diminuindo a quantidade de parâmetros a serem otimizados.
- pelo fato de serem eliminadas as variáveis adjuntas do problema de otimização, reduzindo significativamente a quantidade de equações diferenciais, a solução do problema deixa de ser de um problema de valor no contorno.

CAPÍTULO IV

ESTUDOS DE CASOS

RESUMO

Neste capítulo, os estudos realizados sobre as metodologias para resolução do problema de otimização dinâmica e a metodologia proposta no Capítulo 3 são empregados em exemplos da literatura. Os resultados obtidos validam a metodologia proposta para a abordagem de sistemas algébrico-diferenciais de índice variável.

Conforme apresentado no Capítulo 3, a solução do problema de otimização dinâmica com restrições de igualdade e/ou desigualdade pode ser interpretado como um problema de integração sujeito a descontinuidades, onde as restrições são consideradas parte integrante do modelo. No entanto, devido à forma funcional destas restrições, o sistema de EADs resultante pode se apresentar como índice superior e/ou variável, o que requer um maior esforço computacional para a resolução.

O alto custo computacional, tipicamente associado com cada um dos passos para a resolução do problema de índice variável, motivou a proposta de uma nova metodologia que reúne as vantagens de funções de regularização com códigos numéricos para integração de sistemas de EADs de índice 1 ou superior e a definição prévia da trajetória ótima da variável de controle, através da eliminação das variáveis adjuntas do problema de otimização. Assim, todas as restrições de desigualdade e trajetórias da variável de controle são descritas por funções contínuas apropriadas e o sistema de EADs resultante pode ser integrado usando códigos numéricos como DASSL (PETZOLD, 1989) e DASSLC.

O novo procedimento foi aplicado em diversos exemplos típicos da literatura e os resultados obtidos são apresentados e discutidos ao longo do texto. Estes exemplos foram divididos em quatro grupos: na Seção 4.1, são apresentados dois casos nos quais a aplicação da metodologia identifica que a trajetória ótima não depende da variável de controle. Na Seção 4.2, dois casos com trajetória ótima dependente da variável de controle em diferentes ordens. Na Seção 4.3, um exemplo que, durante a integração do modelo, a variável de controle passa pela trajetória ótima e pela trajetória restrita em momentos diferentes e um exemplo de otimização com duas variáveis de controle. E, por fim, na Seção 4.4, dois exemplos finais nos quais a trajetória ótima da variável de controle é função de sua derivada segunda.

4.1. Problemas de Otimização com Trajetória Puramente Restrita

4.1.1. Reator semi-batelada isotérmico com restrição de segurança

Neste problema, proposto por Ubrich *et al.* (1999), a reação $A + B \rightarrow C$, exotérmica, ocorre em um reator semi-batelada isotérmico com restrição de temperatura e volume, que por sua vez limita a concentração de B segundo o balanço de energia abaixo:

$$T_{cf}(t) = T(t) + c_{Bmax} \frac{-\Delta H}{\rho c_p} \quad 4.1$$

onde T_{cf} é a temperatura de falha de resfriamento; T , temperatura do reator; c_{Bmax} , concentração máxima da espécie B ; ΔH , entalpia de reação; ρ , massa específica; c_p , calor específico.

O objetivo é minimizar o tempo de reação, controlando a taxa de alimentação do reagente B , a fim de se obter uma quantidade pré-definida do produto C . O modelo matemático que descreve a reação é apresentado abaixo:

$$\frac{dc_A}{dt} = -kc_Ac_B - \frac{u}{V}c_A \quad 4.2$$

$$\frac{dc_B}{dt} = -kc_Ac_B + \frac{u}{V}(c_{Bin} - c_B) \quad 4.3$$

$$\frac{dV}{dt} = u \quad 4.4$$

A concentração da espécie C é dada pela relação a seguir:

$$c_C = \frac{c_{A0}V_0 + c_{C0}V_0 - c_A V}{V} \quad 4.5$$

Os valores numéricos são dados na Tabela 4.1.

Tabela 4.1: Condições Iniciais e Constantes Utilizadas.

Variáveis	Valores
k	0,0482 L/mol h
T	70 °C
ΔH	60 000 J/mol
ρ	900 g/L
c_p	4,2 J/gK
c_B	2 mol/L
u_{min}	0 L/h
u_{max}	0,1 L/h
T_{max}	80 °C
V_{max}	1 L
n_{Cdes}	0,6 mol
c_{A0}	2 mol/L
c_{B0}	0,63 mol/L
V_0	0,7 L

O modelo dinâmico pode ser reduzido desde que as três equações sejam linearmente dependentes, como é mostrado a seguir. O balanço de massa das espécies envolvidas agora é apresentado em termos de número de mols do componente ao invés da concentração:

$$\frac{dn_A}{dt} = -kc_Ac_BV \quad 4.6$$

$$\frac{dn_B}{dt} = -kc_Ac_BV + c_{Bin}u \quad 4.7$$

$$\frac{dV}{dt} = u \quad 4.8$$

a Equação 4.6 pode ser expressa em termos de 4.5 e 4.7:

$$\frac{dn_B}{dt} = \frac{dn_A}{dt} + c_{Bin} \frac{dV}{dt} \Rightarrow \frac{d}{dt}(n_B - n_A - c_{Bin}V) = 0 \quad 4.9$$

como $I = n_B - n_A - c_{Bin}V = V(c_B - c_A - c_{Bin}) = 0$, esta equação é invariante (SRINIVASAN, AMRHEIN e BONVIN, 1998). Integrando a Equação 4.9 de 0 a t , c_B é expresso em termos das outras variáveis e condições iniciais:

$$c_B = \frac{(c_{B0} - c_{A0} - c_{Bin})V_0 + (c_A + c_{Bin})V}{V} \quad 4.10$$

Desta forma, o problema de otimização pode ser expresso por:

$$\min_{t_f, u(t)} J = t_f \quad 4.11$$

sujeito a:

$$\frac{dn_A}{dt} = -kc_Ac_BV \quad 4.12$$

$$\frac{dV}{dt} = u \quad 4.13$$

$$n_A = Vc_A \quad 4.14$$

$$c_B = \frac{(c_{B0} - c_{A0} - c_{Bin})V_0 + (c_A + c_{Bin})V}{V} \quad 4.15$$

$$c_C = \frac{c_{A0}V_0 + c_{C0}V_0 - c_A V}{V} \quad 4.16$$

$$T_{cf}(t) = T(t) + c_{Bmax} \frac{-\Delta H}{\rho c_p} \quad 4.17$$

$$u_{min} \leq u(t) \leq u_{max} \quad 4.18$$

$$T_{cf}(t) \leq T_{max} \quad 4.19$$

$$V(t) \leq V_{max} \quad 4.20$$

quando $V = V_{max}$, a alimentação de B é cortada, ou seja, $u = u_{min}$.

$$n_C(t_f) \leq n_{Cdes} \quad 4.21$$

Através das Equações 4.16 e 4.18 chegamos à concentração máxima da espécie B , $c_{Bmax} = 0,63$ mol/L, que é também a concentração inicial de B . Assim, uma nova restrição surge substituindo as restrições da Equações 4.16 e 4.18:

$$c_B(t) \leq c_{Bmax} \quad 4.22$$

Diferenciando a Equação 4.21 obtemos $u_{restrito}$:

$$u_{restrito} = \frac{k c_A c_B V}{c_{Bin} - c_B} \Big|_{c_B=c_{Bmax}} \quad 4.23$$

Na tentativa de se obter o arco singular, onde a trajetória de u é ótima, através das Equações 4.6 e 4.8, a matriz $\mathcal{M} = [\mathbf{F}_u \quad \Delta \mathbf{F}_u]$ indica que a trajetória ótima não depende da variável de controle e que a trajetória ótima é sempre determinada pelas restrições:

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} -k c_A c_B V \\ u \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F}_u = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \Delta \mathbf{F}_u = \begin{bmatrix} k c_A (c_{Bin} - c_B) \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \Delta^2 \mathbf{F}_u = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad 4.24$$

onde $\Delta^\sigma \mathbf{F}_u$ é independente de u para $\sigma \rightarrow \infty$.

Desta forma, o problema de otimização é dado pela busca do tempo em que ocorre a ativação da restrição e do tempo final no qual a concentração da espécie C desejada é alcançada.

Aplicando-se a função de regularização na variável controlada u , temos o seguinte:

$$\eta = \frac{1 + \tanh\left(\frac{V - V_{max}}{\xi}\right)}{2} \quad 4.25$$

onde $\xi = 10^{-5}$, $\eta = 0$, enquanto $V < V_{max}$ e $\eta = 1$, em caso contrário.

$$u = \eta \cdot u_{min} + (1 - \eta) \cdot u_{restrito} \quad 4.26$$

O problema de otimização agora é reduzido a uma integração de sistema de EADs de índice 1, onde o tempo no qual a concentração de C desejada é facilmente encontrada. A aplicação da função de regularização excluiu a necessidade de se encontrar o tempo no qual $V = V_{max}$, t_s , pois a função de regularização suaviza esta mudança de modelo, não sendo necessário localizá-la e reiniciar o modelo com novas condições iniciais consistentes. Por uma simples busca no resultado final obtemos t_s e t_f , respectivamente, 11,44502 h e 19,80162 h, coerentes aos resultados obtidos por

Srinivasan *et al.* (2003), $t_s = 11,44 h$ e $t_f = 19,80 h$, que utilizou abordagem analítica do sistema, e por Pfeifer (2007), $t_s = 11,44478 h$ e $t_f = 19,801017 h$, que utilizou funções identificadoras de mudança de fase associadas a um sistema estendido por variáveis adjuntas, sendo solucionado como um problema de valor de contorno. Os resultados são apresentados a seguir (Figuras 4.1 a 4.3). As tolerâncias utilizadas relativa e absoluta no integrador foram 10^{-6} e 10^{-8} , respectivamente.

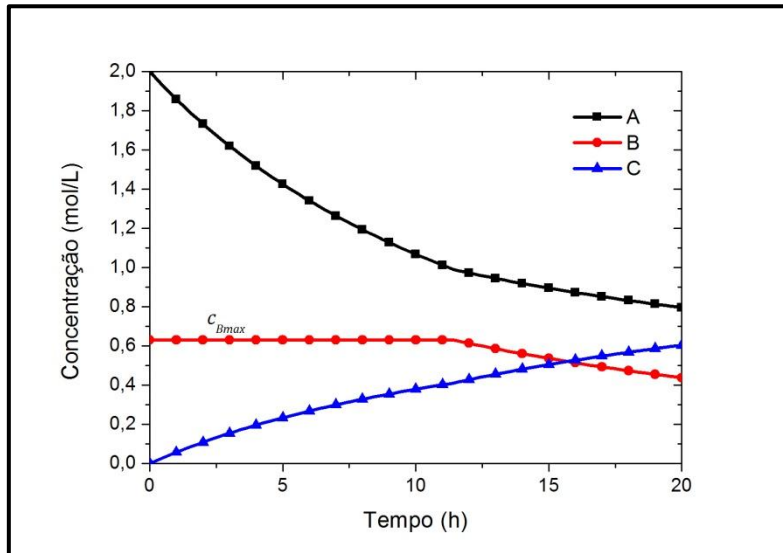


Figura 4.1: Evolução das Concentrações de A, B e C.

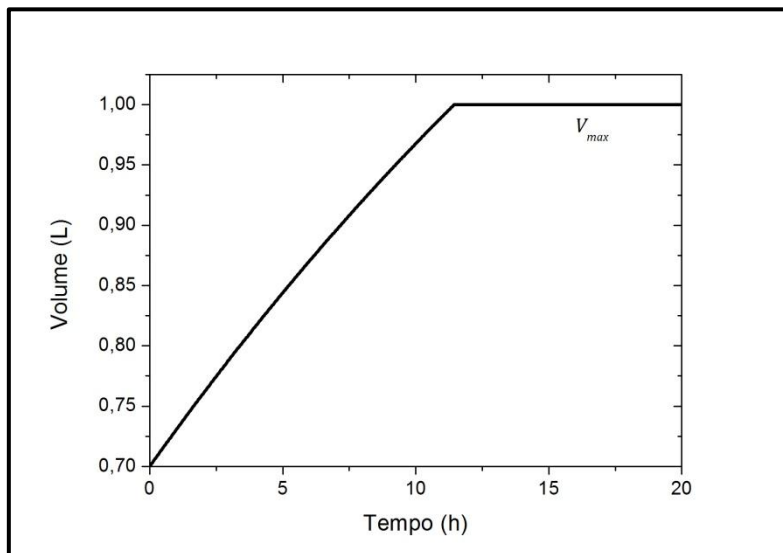


Figura 4.2. Resultados para o incremento do Volume.

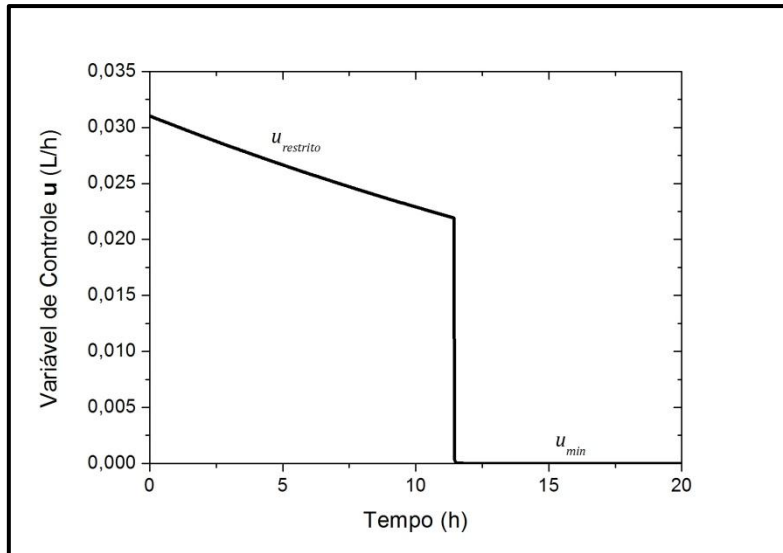


Figura 4.3: Resultados Obtidos para Ação de Controle.

4.1.2. Reator Batelada com Restrição de Pressão

As seguintes reações gasosas ocorrem isotermicamente e com restrição de pressão em um reator batelada (FEEHERY, 1998; HUANG *et al.*, 2002)



O problema de otimização dinâmica é dado por:

$$\min_{u(t)} J = x_3(t_f) \quad 4.29$$

$$\frac{dx_1}{dt} = -k_1x_1 + k_2x_2^2 + \frac{u}{V} - k_3x_1x_2 \quad 4.30$$

$$\frac{dx_2}{dt} = k_1x_1 - k_2x_2^2 - k_3x_1x_2 \quad 4.31$$

$$\frac{dx_3}{dt} = k_3x_1x_2 \quad 4.32$$

$$N = V(x_1 + x_2 + x_3) \quad 4.33$$

$$PV = NRT \quad 4.34$$

$$P \leq P_{max} \quad 4.35$$

$$u_{min} \leq u(t) \leq u_{max} \quad 4.36$$

e as condições iniciais dadas por:

$$x_1(0) = 100,0 \quad 4.37$$

$$x_2(0) = 0,0 \quad 4.38$$

$$x_3(0) = 0,0 \quad 4.39$$

onde x_1 , x_2 e x_3 são as concentrações das espécies A , B e D , respectivamente, P é pressão do reator, N é o número de mols total, V é o volume do reator, R é a constante dos gases, u é a taxa de alimentação de A puro, e k_1 , k_2 e k_3 são constantes de reação.

A Tabela 4.2 traz os valores dos parâmetros.

Tabela 4.2: Parâmetros e Constantes Utilizadas.

Variáveis	Valores
k_1	0,8 h ⁻¹
k_2	0,02 m ³ /(mol h)
k_3	0,003 m ³ /(mol h)
V	1,0 m ³
T	400,0 K
R	8,314 J/(mol K)
P_{max}	340.000,0 Pa
u_{min}	0,0 mol/h
u_{max}	8,5 mol/h

Para este problema, assim como o anterior, se utilizássemos métodos convencionais, deveríamos identificar o tempo onde ocorre a ativação da restrição para que o modelo seja reinicializado com condições iniciais coerentes. A seguir, o problema teria que ser solucionado por discretização de todas as variáveis de estado e de controle ou por um sistema estendido por variáveis adjuntas (problema de valor no contorno) associado a uma função identificadora de mudança de fase (mudança de modelo). Neste exemplo, em particular, quando a restrição está ativa, o índice do problema (que era igual a 0, ou seja, um sistema de EDOs), passa a ser igual a 1 (EADs).

Através da abordagem proposta nesta dissertação, podemos resolver este problema sem a necessidade de se identificar o momento em que ocorre a ativação da restrição, t_s , uma vez que com a utilização de função de regularização, esta passagem passa a ser automatizada.

Ao tentar obter o arco singular onde a trajetória de u é ótima através das Equações 4.30 – 4.32, a matriz $\mathcal{M} = [F_u \quad \Delta F_u \quad \Delta^2 F_u]$ indica que a trajetória ótima não depende da variável de controle e que a trajetória ótima é sempre determinada pelas restrições, pois u não aparece explícito em nenhum $\Delta^\sigma F_u$, com $\sigma \rightarrow \infty$:

$$\begin{aligned}
\mathbf{F} &= \begin{bmatrix} -k_1x_1 + k_2x_2^2 + \frac{u}{V} - k_3x_1x_2 \\ k_1x_1 - k_2x_2^2 - k_3x_1x_2 \\ k_3x_1x_2 \end{bmatrix}, \\
\mathbf{F}_u &= \begin{bmatrix} \frac{1}{V} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \Delta\mathbf{F}_u = \frac{1}{V} \begin{bmatrix} k_1 + k_3x_2 \\ -k_1 + k_3x_2 \\ -k_3x_2 \end{bmatrix}, \\
\Delta^2\mathbf{F}_u &= \frac{1}{V} \begin{bmatrix} -k_2k_3x_2^2 + k_1^2 + 2k_1k_3x_2 + k_3^2x_2^2 + 2k_1k_2x_2 \\ k_2k_3x_2^2 - k_1^2 + k_3^2x_2^2 - 2k_1k_2x_2 \\ k_3x_2(k_2x_2 - k_1 - k_3x_2) \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{4.40}$$

$u_{restrito}$ é dado pela derivação da restrição na pressão:

$$u_{restrito} = k_3Vx_1x_2 \tag{4.41}$$

A função de regularização utilizada é dada por:

$$\eta = \frac{1 + \tanh\left(\frac{P - P_{max}}{\xi}\right)}{2} \tag{4.42}$$

onde $\xi = 10^{-5}$.

A variável de controle regularizada é apresentada a seguir:

$$u = \eta \cdot u_{restrito} + (1 - \eta) \cdot u_{max} \tag{4.43}$$

Como o tempo final não é variável de otimização, o problema de otimização passar a ser uma integração de um sistema de equações algébrico linear, com flutuação de índice de 0 para 1, e o momento em que ocorre a ativação da restrição pode ser obtido por simples busca nos resultados da integração. Desta forma, através dos resultados obtidos temos que $t_s = 0,4740$ e $x_3(t_f) = 11,7284$, iguais aos obtidos por Lobato (2004) utilizando o DIRCOL , discretização total da variáveis. As Figuras 4.4 a 4.6 mostram os resultados obtidos. As tolerâncias relativa e absoluta utilizadas no integrador foram 10^{-6} e 10^{-4} , respectivamente.

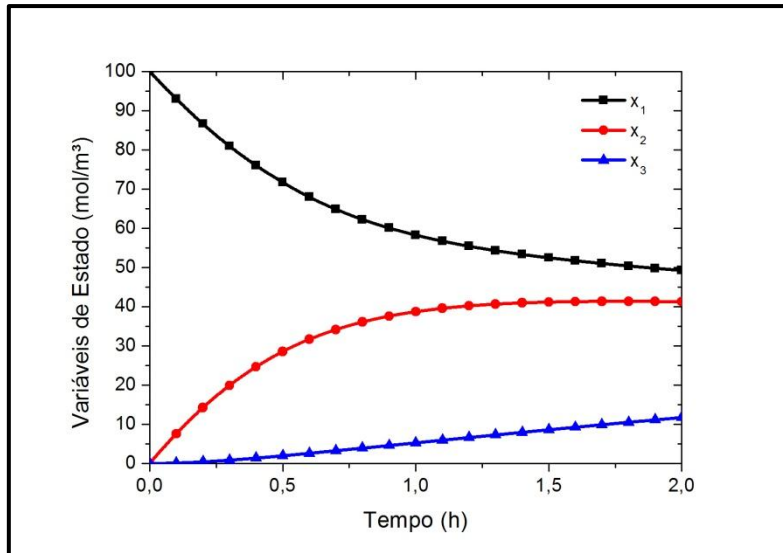


Figura 4.4: Resultados Obtidos para as Variáveis de Estado.

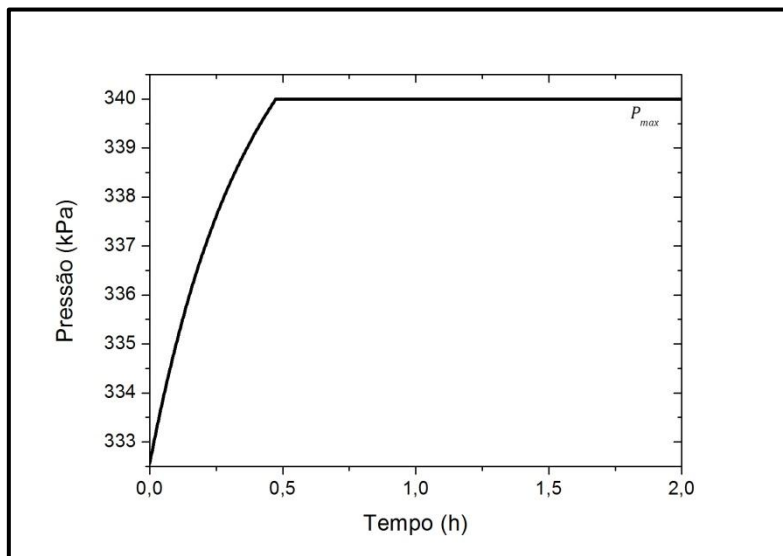


Figura 4.5: Perfil de Pressão no interior do Reator.

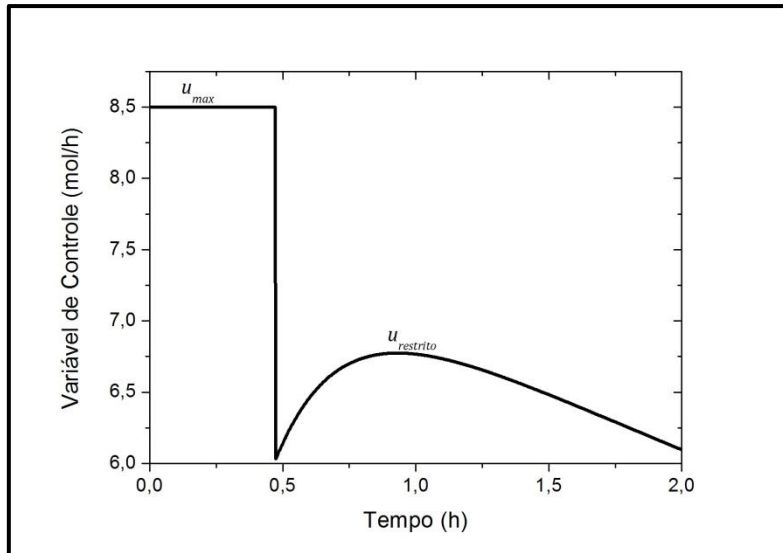


Figura 4.6: Ação de Controle.

4.2. Problemas de Otimização com Trajetória Viável

4.2.1. Reator isotérmico semi-batelada com reações paralelas e restrições de seletividade

Considere um reator semi-batelada, no qual ocorrem as seguintes reações paralelas: $A + B \rightarrow C$ e $2B \rightarrow D$, proposto por Ruppen *et al.* (1998) e Srinivasan *et al.* (2001, 2003). O objetivo deste problema é maximizar a produção de C em um tempo já definido. A formulação do problema de otimização é dada por:

$$\max_{u(t)} J = V(t_f)c_C(t_f) \quad 4.44$$

sujeito a:

$$\frac{dc_A}{dt} = -k_1c_Ac_B - \frac{u}{V}c_A, \quad c_A(0) = c_{A0} \quad 4.45$$

$$\frac{dc_B}{dt} = -k_1c_Ac_B - 2k_2c_B^2 + \frac{u}{V}(c_{Bin} - c_B), \quad c_B(0) = c_{B0} \quad 4.46$$

$$\frac{dV}{dt} = u, \quad V(0) = V_0 \quad 4.47$$

$$c_C = \frac{1}{V}(c_{A0}V_0 - c_AV) \quad 4.48$$

$$c_D = \frac{1}{2V}((c_A + c_{Bin} - c_B)V - (c_{A0} + c_{Bin} - c_{B0})V_0) \quad 4.49$$

$$u_{min} \leq u(t) \leq u_{max} \quad 4.50$$

$$c_B(t_f) \leq c_{Bf,max} \quad 4.51$$

$$c_D(t_f) \leq c_{Df,max} \quad 4.52$$

onde c_x são as concentrações das espécies A , B , C e D , respectivamente, u é taxa de alimentação do componente B , V é o volume do reator, k_1 e k_2 são parâmetros cinéticos. Os parâmetros e as condições operacionais são apresentados na Tabela 4.3.

Tabela 4.3: Condições Iniciais e Constantes Utilizadas.

Variáveis	Valores
k_1	0,053 L/mol min
k_2	0,128 L/mol min
c_{Bin}	5 mol/L
u_{min}	0 L/min
u_{max}	0,001 L/min
$c_{Bf,max}$	0,025 mol/L
$c_{Df,max}$	0,15 mol/L
c_{A0}	0,72 mol/L
c_{B0}	0,05 mol/L
V_0	1 L
t_f	250 min

De acordo com Srinivasan *et al.* (2003), o problema pode ser descrito em 3 fases, devido às restrições de desigualdade nas variáveis de estado e controle. Estas fases são obtidas através da análise física do problema e podem ser descritas conforme abaixo:

- Primeira Fase: devemos ter $u = u_{max}$, para aumentarmos B o mais rápido quanto possível.
- Segunda Fase: limitar a quantidade de D produzida, através da solução trajetória ótima da variável de entrada (arco singular, $u = u_{ótimo}$).
- Terceira Fase: devemos ter $u = u_{min}$ para alcançarmos c_B em t_f .

A expressão analítica de $u_{ótimo}$ pode ser determinada utilizando a matriz

$$\mathcal{M} = [\mathbf{F}_u \quad \Delta\mathbf{F}_u \quad \Delta^2\mathbf{F}_u]:$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{F} &= \begin{bmatrix} -k_1 c_A c_B \\ -k_1 c_A c_B - 2k_2 c_B^2 \\ 0 \end{bmatrix} + \frac{1}{V} \begin{bmatrix} -c_A \\ c_{Bin} - c_B \\ 0 \end{bmatrix} u, & \mathbf{F}_u &= \frac{1}{V} \begin{bmatrix} -c_A \\ c_{Bin} - c_B \\ 0 \end{bmatrix}, \\
\Delta \mathbf{F}_u &= \frac{1}{V} \begin{bmatrix} k_1 c_A (c_{Bin} - c_B) \\ k_1 c_A (c_{Bin} - c_B) + 2k_2 c_B (2c_{Bin} - c_B) \\ 0 \end{bmatrix}, \\
\Delta^2 \mathbf{F}_u &= \frac{c_{Bin}}{V} \begin{bmatrix} k_1^2 c_A^2 + 4k_1 k_2 c_A c_B \\ k_1^2 c_A^2 + 4k_1 k_2 c_A c_B + 8k_2^2 c_B^2 \\ 0 \end{bmatrix} \\
&\quad + \frac{1}{V^2} \begin{bmatrix} k_1 c_A \\ k_1 c_A - 2k_2 (c_{Bin} - c_B) \\ 0 \end{bmatrix} u
\end{aligned} \tag{4.53}$$

Calculando o $\det(\mathcal{M}) = 0$, obtemos $u_{\acute{o}timo}$:

$$u_{\acute{o}timo} = \frac{c_B V (k_1 c_A (2c_{Bin} - c_B) + 4k_2 c_B c_{Bin})}{2c_{Bin} (c_{Bin} - c_B)} \tag{4.54}$$

Desta forma o problema de otimizao passa a ter 2 variveis controladas que so o tempo de mudana de fase entre a primeira e segunda fase, t_{s1} , e entre a segunda e a terceira fase, t_{s2} . Estas mudanas de fase provocam descontinuidades no modelo que alteram o ndice diferencial do sistema, e para evitar os supracitados problemas aplicaremos duas funes de regularizao para suavizar esta descontinuidade:

$$\eta_1 = \frac{1 + \tanh\left(\frac{t - t_{s1}}{\xi}\right)}{2} \tag{4.55}$$

$$\eta_2 = \frac{1 + \tanh\left(\frac{t - t_{s2}}{\xi}\right)}{2} \tag{4.56}$$

onde $\xi = 10^{-5}$.

Em seguida, define-se a varivel de controle u regularizada e a adiciona ao problema de otimizao:

$$u = (1 - \eta_1) \cdot u_{max} + \eta_1 \cdot ((1 - \eta_2) \cdot u_{\acute{o}timo} + \eta_2 \cdot u_{min}) \tag{4.57}$$

Os resultados so apresentados na Tabela 4.4:

Tabela 4.4: Resultados obtidos para Funo objetivo

Referncia	t_{s1}	t_{s2}	Funo objetivo
Srinivasan <i>et al.</i> (2003)	20,25	205	0,43
Pfeifer (2007)	20,2495	205,0013	0,43058
DIRCOL	20,249041	205,00547	0,43059
Este trabalho	20,3602596	206,1508215	0,4317211

As trajetórias de estado e controle são mostradas nas Figuras 4.7 e 4.8. As tolerâncias relativa e absoluta utilizadas no integrador foram 10^{-12} e 10^{-9} , respectivamente, e a tolerância utilizada no otimizador foi 10^{-7} .

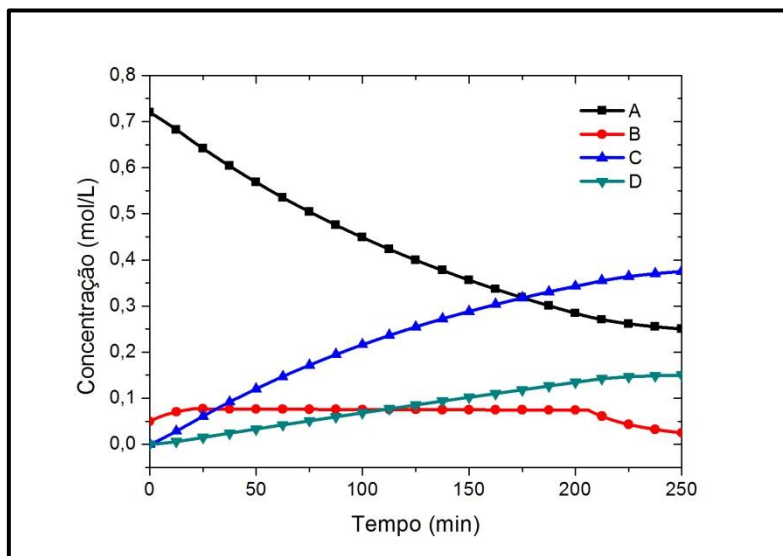


Figura 4.7: Concentração das espécies A , B e D .

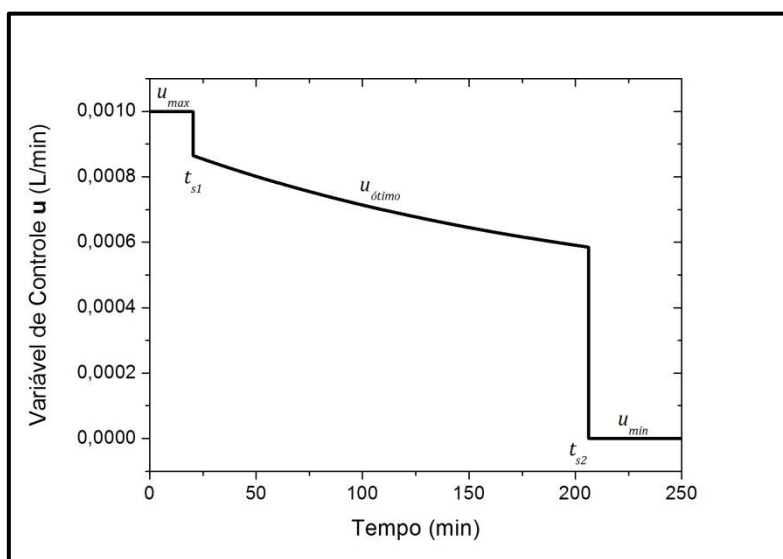


Figura 4.8: Ação de Controle.

4.2.2. Mistura de Catalisadores

A proposta deste problema é determinar a melhor mistura entre dois catalisadores ao longo de um reator PFR onde ocorre uma reação do tipo $A \xrightleftharpoons{cat\ 1} B \xrightarrow{cat\ 2} C$ capaz de maximizar a produção de C . As variáveis de estado x_1 , x_2 e x_3 representam, respectivamente, as concentrações de A , B e C e a variável u representa a taxa de mistura dos catalisadores $\left(u = \frac{cat\ 1}{cat\ 1 + cat\ 2}\right)$ ao longo do reator PFR que apresenta um segmento singular que causa sérias dificuldades em sua resolução (LOGSDON e BIEGLER; 1989). A reação $A \rightleftharpoons B$ é catalisada por $cat\ 1$ e a reação $B \rightarrow C$ por $cat\ 2$. A formulação deste problema é apresentada a seguir:

$$\max_{u(t)} J = x_3(t_f) \quad 4.58$$

sujeito a:

$$\frac{dx_1}{dt} = u(10x_2 - x_1) \quad 4.59$$

$$\frac{dx_2}{dt} = u(x_1 - 10x_2) - (1 - u)x_2 \quad 4.60$$

$$x_3 = 1 - x_1 - x_2 \quad 4.61$$

$$u_{min} \leq u(t) \leq u_{max} \quad 4.62$$

$$x_1(0) = 1 \quad 4.63$$

$$x_2(0) = 0 \quad 4.64$$

onde $u_{min} = 0$ e $u_{max} = 1$; t é o tempo de residência no interior do reator PFR para um dado valor de vazão. Desta forma, a variável t está relacionada ao deslocamento do meio reacional (posição) no interior do reator.

Este problema possui três fases distintas (segmentos do reator PFR): a primeira fase onde $u = u_{max}$, favorecendo a produção de B ; a segunda onde $u = u_{ótimo}$, definido pelo arco singular onde a reação $A \rightleftharpoons B$ é deslocada a favor do produto B que está sendo consumido pela reação $B \rightarrow C$; e a terceira fase onde $u = u_{min}$, favorecendo a produção de C . O objetivo é encontrar os tempos de mudança de fase, t_{s1} e t_{s2} , ou seja, o tamanho dos três segmentos que maximize o produto C . Desta forma utilizaremos duas funções de regularização que definirão em que fase a integração do problema se encontra:

$$\eta_1 = \frac{1 + \tanh\left(\frac{t - t_{s1}}{\xi}\right)}{2} \quad 4.65$$

$$\eta_2 = \frac{1 + \tanh\left(\frac{t - t_{s2}}{\xi}\right)}{2} \quad 4.66$$

onde $\xi = 10^{-5}$.

Aplicando estas funções de regularização na variável de controle, temos:

$$u = (1 - \eta_1) \cdot u_{max} + \eta_1 \cdot ((1 - \eta_2) \cdot u_{ótimo} + \eta_2 \cdot u_{min}) \quad 4.67$$

Para definição de $u_{ótimo}$ aplicaremos o procedimento de eliminação das variáveis adjuntas para encontrarmos a matriz \mathcal{M} :

$$\begin{aligned} \mathbf{F} &= \begin{bmatrix} u(10x_2 - x_1) \\ u(x_1 - 10x_2) - (1 - u)x_2 \end{bmatrix}, & \mathbf{F}_u &= \begin{bmatrix} 10x_2 - x_1 \\ x_1 - 9x_2 \end{bmatrix}, \\ \Delta\mathbf{F}_u &= \begin{bmatrix} -10x_2 \\ x_1 \end{bmatrix}, & \Delta^2\mathbf{F}_u &= \begin{bmatrix} -20u x_1 + 80u x_2 + 10x_2 \\ 20u x_2 + 8u x_1 + x_1 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad 4.68$$

Assim a matriz \mathcal{M} é definida por $[\mathbf{F}_u \quad \Delta\mathbf{F}_u \quad \Delta^2\mathbf{F}_u]$ que é uma matriz 2 x 3. Logo, para encontrar o $u_{ótimo}$ é necessário o cálculo da determinante da submatriz \mathcal{M}_i , na qual $\Delta^2\mathbf{F}_u$ é uma das colunas, restando duas submatrizes restantes. Para a submatriz $\mathcal{M}_1 = [\Delta\mathbf{F}_u \quad \Delta^2\mathbf{F}_u]$, da qual obtemos, através de sua determinante, $u_{ótimo}^1$:

$$u_{ótimo}^1 = \frac{20x_2x_1}{-200x_2^2 - 160x_2x_1 + 20x_1^2} \quad 4.69$$

Para a submatriz $\mathcal{M}_2 = [\mathbf{F}_u \quad \Delta^2\mathbf{F}_u]$, temos:

$$u_{ótimo}^2 = \frac{x_1^2 - 90x_2^2}{920x_2^2 - 200x_2x_1 + 12x_1^2} \quad 4.70$$

O problema de otimização foi reduzido à busca dos tempos onde ocorrem as mudanças de fase, eliminando a utilização de variáveis adjuntas e sem a necessidade de reinicializar o sistema, como já foi visto em exemplos anteriores. A utilização de qualquer uma das duas trajetórias ótimas da variável de controle não interfere nos resultados obtidos, pois o quando a ação de controle está ativa em $u_{ótimo}$, o perfil de $u_{ótimo}^1$ é igual ao $u_{ótimo}^2$. As tolerâncias relativa e absoluta utilizadas no integrador foram 10^{-12} e 10^{-8} , respectivamente, e a tolerância utilizada no otimizador foi 10^{-7} . Os resultados obtidos são apresentados na Tabela 4.5, com $t_{s1} = 0,1363$ e $t_{s2} =$

0,7252, e nas Figuras 4.9 a 4.12, onde os perfis das variáveis de estado e controle são plotados:

Tabela 4.5: Resultados obtidos para Função objetivo

Referência	Função objetivo
Vassiliadis (1993)	0,0480557
Bell e Sargent (2000)	0,0480800
Lobato (2004)	0,048047
Este trabalho	0,0480557

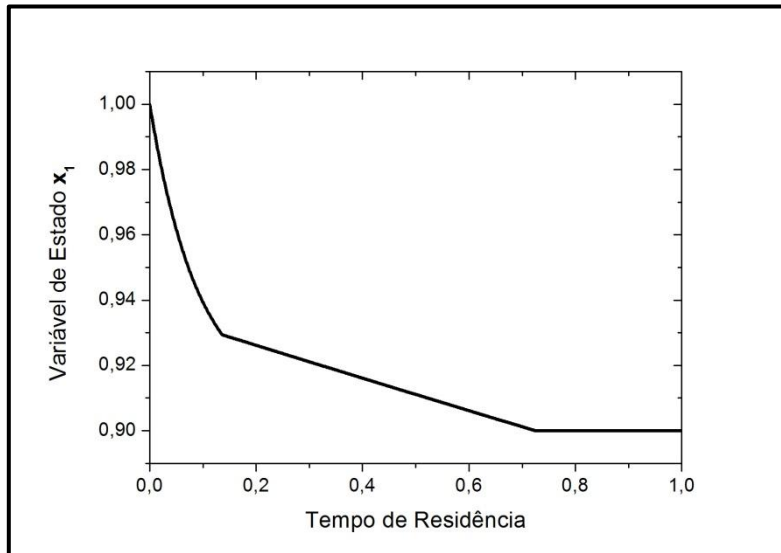


Figura 4.9: Perfil da Variável de Estado x_1 .

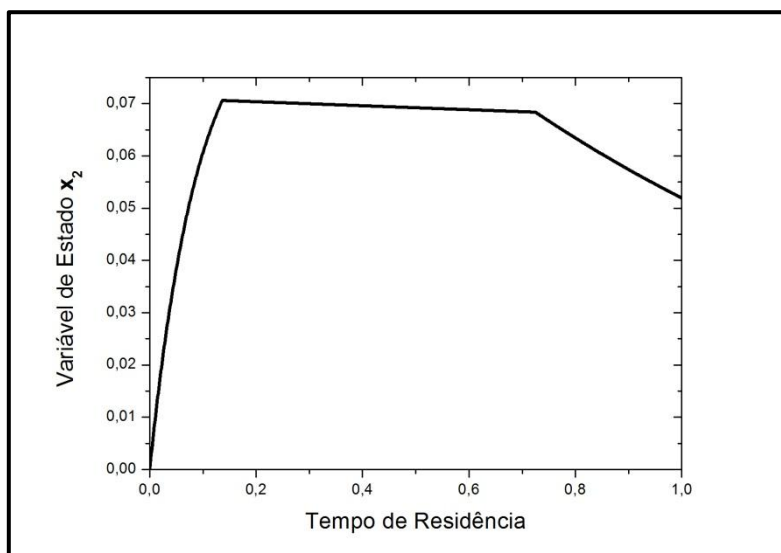


Figura 4.10: Perfil da Variável de Estado x_2 .

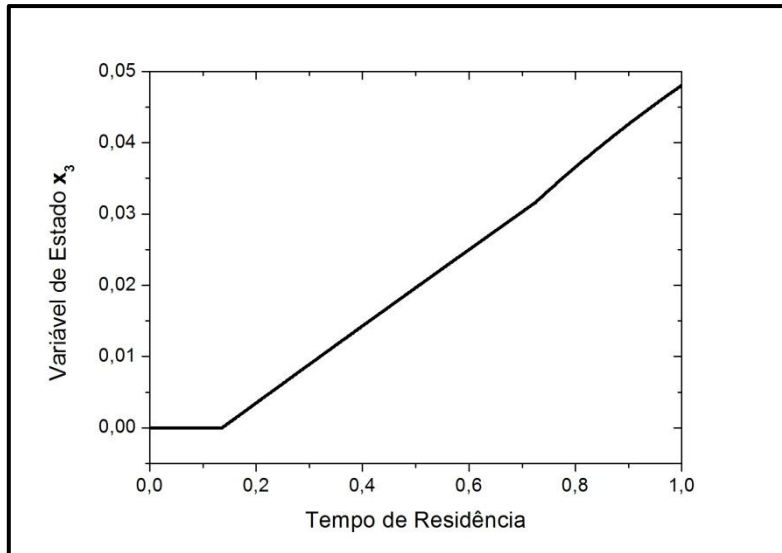


Figura 4.11: Perfil da Variável de Estado x_3 .

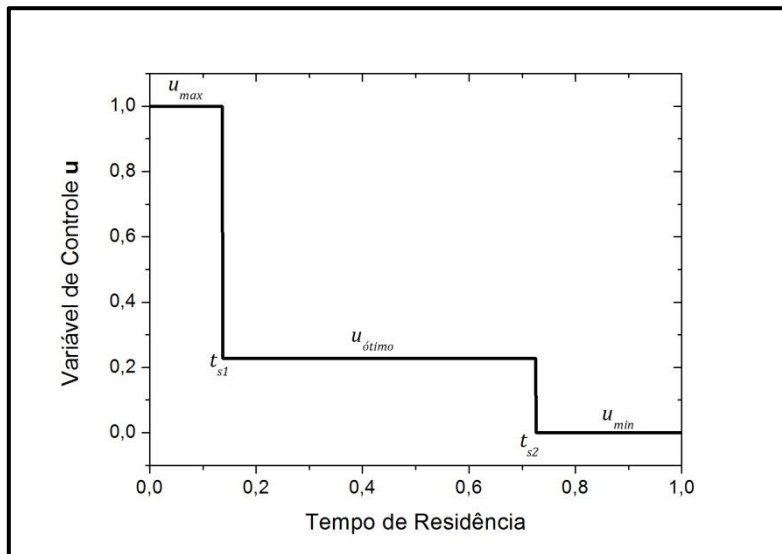


Figura 4.12: Razão de mistura dos catalisadores ao longo do reator PFR.

4.3. Problema de Otimização com Restrição e Trajetória Viável Simultâneos

4.3.1. Biorreator batelada alimentada com inibição e restrição de biomassa

Em um biorreator batelada alimentada (processo descontínuo alimentado, VISSER *et al.*, 2000) há entrada somente de substrato e os produtos são retirados apenas no final da fermentação. A adição controlada de nutrientes afeta diretamente a taxa de crescimento da cultura e permite evitar o grande fluxo metabólico. O processo

descontínuo alimentado é uma estratégia tipicamente usada em processos bioindustriais para alcançar alta densidade celular no biorreator. Assim, a operação em batelada alimentada pode ser definida com a busca pela política ótima de adição de um dos reagentes.

E com objetivo de maximizar a concentração do produto P no tempo final de reação, manipulando a taxa de alimentação de S , limitados pela concentração máxima de biomassa e limites da alimentação. Para este exemplo a taxa de crescimento específico $\mu(S)$ tem um termo de inibição:

$$\mu(S) = \frac{\mu_m S}{K_m + S + \frac{S^2}{K_i}} \quad 4.71$$

Devido à presença de inibição, o valor ótimo do substrato corresponde a $\frac{d\mu}{dS} = 0$ ($S^* = \sqrt{K_m K_i}$). Sem qualquer restrição, a operação ótima consistiria em $S = S^*$ que aumentasse X , e conseqüentemente P , o mais rápido possível. Entretanto, com a existência de uma restrição na concentração de biomassa, que é motivada pela limitação típica de transferência de oxigênio em concentrações elevadas de biomassa. A parte interessante deste problema é que a entrada ótima não pode trocar imediatamente entre $u_{ótimo}$ e $u_{restrito}$, pois tornaria a dinâmica interna instável. Desta forma, um arco adicional é requerido para diminuir a concentração de substrato para um valor de equilíbrio S_e . O modelo matemático deste biorreator é apresentado a seguir:

$$\frac{dX}{dt} = \mu(S)X - \frac{u}{V}X, \quad X(0) = X_0 \quad 4.72$$

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{\mu(S)X}{Y_x} - \frac{vX}{Y_p} + \frac{u}{V}(S_{in} - S), \quad S(0) = S_0 \quad 4.73$$

$$\frac{dP}{dt} = vX - \frac{u}{V}P, \quad P(0) = P_0 \quad 4.74$$

$$\frac{dV}{dt} = u, \quad V(0) = V_0 \quad 4.75$$

onde S é a concentração de substrato, X é a concentração de biomassa, P , a concentração de produto, V , volume; u , taxa de alimentação; S_{in} , concentração do substrato na entrada; μ_m , K_m , K_i e v parâmetros cinéticos; e Y_x , Y_p , coeficientes de produção.

Como este modelo apresenta uma variável redundante, o modelo pode ser reduzido para que os cálculos sejam simplificados:

$$\frac{dx_1}{dt} = \mu(S)x_1 \quad 4.76$$

$$\frac{dx_2}{dt} = vx_1 \quad 4.77$$

$$\frac{dx_3}{dt} = u \quad 4.78$$

com $x_1 = XV$, $x_2 = PV$ e $x_3 = V$, onde a concentração do substrato é obtida por balanço de massa:

$$S = \frac{1}{x_3} \left(S_0V_0 + S_{in}(x_3 - V_0) - \frac{1}{Y_x}(x_1 - X_0V_0) - \frac{1}{Y_p}(x_2 - P_0V_0) \right) \quad 4.79$$

Assim o problema de otimização é definido como:

$$\max_u J = P(t_f) \quad 4.80$$

sujeito a:

Equações 4.76-4.79, 4.71

$$u_{min} \leq u(t) \leq u_{max} \quad 4.81$$

$$X(t) \leq X_{max} \quad 4.82$$

Segundo Srinivasan *et al.* (2003), este problema de otimização pode ser dividido em 4 fases:

- Primeira Fase: Inicialmente, $u = u_{max}$ para que a concentração de S aumente o mais rápido possível.
- Segunda Fase: Uma vez que a concentração de substrato chega ao seu valor ótimo (S^*), então $u = u_{ótimo}$ é aplicado para manter S no valor S^* e então aumentar a concentração de X e P o mais rápido possível. A entrada u está na região viável.
- Terceira Fase: A variável de controle é reduzida ao seu valor mínimo ($u = u_{min}$) de forma que o valor de equilíbrio da concentração do substrato (S_e) seja alcançado rapidamente. O tempo de troca da segunda para terceira fase, t_s , deve ser tal que $X = X_{max}$ e $S = S_e$ ocorram num mesmo instante.
- Quarta Fase: Quando a biomassa chega ao seu valor máximo, $X = X_{max}$, u deve ser igual a $u_{restrito}$ de forma a manter $X = X_{max}$ e $S = S_e$.

A expressão analítica para $u_{\acute{o}timo}$ pode ser calculada a partir da perda de *rank* da matriz $\mathcal{M} = [\mathbf{F}_u \quad \Delta\mathbf{F}_u \quad \Delta^2\mathbf{F}_u]$ tendo como base o sistema reduzido:

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \mu(S)x_1 \\ vx_1 \\ u \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F}_u = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \Delta\mathbf{F}_u = - \begin{bmatrix} \frac{\partial\mu}{\partial x_3}x_1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix},$$

$$\Delta^2\mathbf{F}_u = \begin{bmatrix} \left(\frac{\partial\mu}{\partial x_1} \frac{\partial\mu}{\partial x_3} - \mu \frac{\partial^2\mu}{\partial x_1 \partial x_3} - v \frac{\partial^2\mu}{\partial x_2 \partial x_3} \right) x_1^2 \\ v \frac{\partial\mu}{\partial x_3} x_1 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{\partial^2\mu}{\partial x_3^2} x_1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} u \quad 4.83$$

A matriz \mathcal{M} tem *rank* estrutural $\rho = 3$, no entanto o *rank* depende das variáveis de estado. A perda de *rank* pode ser analisada pelo $\det(\mathcal{M}) = 0$, que ocorre quando:

$$v x_1^2 \left(\frac{\partial\mu}{\partial x_3} \right)^2 = v x_1^2 \left(\frac{\partial\mu}{\partial S} \frac{\partial S}{\partial x_3} \right)^2 = v \frac{x_1^2}{x_3^2} (S_{in} - S)^2 \left(\frac{\partial\mu}{\partial S} \right)^2 = 0 \quad 4.84$$

Como $x_1 = 0$ e $S = S_{in}$ são soluções triviais, a perda do *rank* ocorre para $\frac{\partial\mu}{\partial S} = 0$, que corresponde a $S = S^* = \sqrt{K_m K_i}$. Como a variável de controle aparece em $\Delta^2\mathbf{F}_u$ e $\det(\mathcal{M})$ é independente de u uma vez que o vetor que multiplica u é paralelo a $\Delta\mathbf{F}_u$. Então uma derivação adicional em relação ao tempo de $S = S^*$ é necessária para obtermos $u_{\acute{o}timo}$:

$$S = S^*$$

$$\left. \frac{dS}{dt} \right|_{S=S^*} = - \frac{\mu(S^*)X}{Y_x} - \frac{vX}{Y_p} + \frac{u}{V} (S_{in} - S^*) = 0 \quad 4.85$$

$$u_{\acute{o}timo} = \frac{V}{S_{in} - S^*} \left(\frac{\mu(S^*)}{Y_x} + \frac{v}{Y_p} \right) X$$

Para encontrar a expressão analítica de $u_{restrito}$, devemos diferenciar a restrição $X = X_{max}$:

$$X = X_{max}$$

$$\left. \frac{dX}{dt} \right|_{X=X_{max}} = \mu(S)X - \frac{u}{V}X \Big|_{X=X_{max}} = 0 \quad 4.86$$

$$u_{restrito} = \mu(S)V \Big|_{X=X_{max}}$$

Da mesma forma para calcularmos a concentração de equilíbrio S_e , devemos também diferenciar a condição $S = S_e$ com $X = X_{max}$:

$$\begin{aligned}
 S &= S_e|_{X=X_{max}} \\
 \left. \frac{dS}{dt} \right|_{\substack{S=S_e, \\ X=X_{max}}} &= -\frac{\mu(S_e)X_{max}}{Y_x} - \frac{\nu X_{max}}{Y_p} + \frac{u_{restrito}}{V}(S_{in} - S_e) = 0 \\
 &-\frac{\mu(S_e)X_{max}}{Y_x} - \frac{\nu X_{max}}{Y_p} + \mu(S_e)(S_{in} - S_e) = 0 \\
 S_e &= \frac{1}{2Y_x(\nu X_{max} + \mu_m K_i Y_p)} \left(\mu_m K_i Y_p Y_x S_{in} - K_i X_{max} (\mu_m Y_p - \nu Y_x) \right. \\
 &\quad - \left(\mu_m^2 X_{max}^2 K_i^2 \left(Y_p^2 + \frac{2\nu Y_p Y_x}{\mu_m} - \frac{2Y_p^2 Y_p S_{in}}{\mu_m^2 X_{max}} + \frac{\nu^2 Y_x^2}{\mu_m^2} \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. - \frac{2\nu Y_p Y_x^2 S_{in}}{\mu_m X_{max}} + Y_p^2 Y_x^2 S_{in}^2 \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. - \frac{4K_m}{\mu_m^2} \left(\frac{\nu^2 Y_x^2}{K_i} + \frac{\mu_m \nu Y_x^2 Y_p}{X_{max}} \right) \right) \right)^{\frac{1}{2}}
 \end{aligned} \tag{4.87}$$

Os valores das constantes e condições iniciais utilizadas neste exemplo são apresentados na Tabela 4.6.

Tabela 4.6: Condições Iniciais e Constantes Utilizadas.

Variáveis	Valores
μ_m	0,53 L/h
K_m	1,2 g/L
K_i	22 g/L
Y_x	0,4
Y_p	1
ν	0,5 L/h
S_{in}	20 g/L
u_{min}	0 L/h
u_{max}	1 L/h
X_{max}	3 g/L
t_f	8 h
X_0	1 g/L
S_0	0 g/L
P_0	0 g/L
V_0	2 L

Como $S_e = 0,3669346$, obtido da Equação 4.87, que deverá ser o valor final de S na última fase, o problema passa a ser encontrar t_s de forma a atender também $S(t_f) = S_e$.

Para aplicar a regularização das variáveis deveremos utilizar 3 variáveis de regularização:

$$\eta_1 = \frac{1 + \tanh\left(\frac{X - X_{max}}{\xi}\right)}{2} \quad 4.88$$

$$\eta_2 = \frac{1 + \tanh\left(\frac{S - S_e}{\xi}\right)}{2} \quad 4.89$$

$$\eta_3 = \frac{1 + \tanh\left(\frac{t - t_s}{\xi}\right)}{2} \quad 4.90$$

onde $\xi = 10^{-5}$.

A variável de controle é dada por:

$$u = (1 - \eta_3)(\eta_2 u_{ótimo} + (1 - \eta_2)u_{max}) + \eta_3((1 - \eta_1)u_{min} + \eta_1 u_{restrito}) \quad 4.91$$

E para que a condição $S = S_e$ seja garantida, aplicaremos também em $\frac{dS}{dt}$, para que seja igual a zero quando ativa, evitando-se, assim, instabilidade no processo de otimização:

$$\frac{dS}{dt} = (1 - \eta_1) \cdot \left(-\frac{\mu(S)X}{Y_x} - \frac{vX}{Y_p} + \frac{u}{V}(S_{in} - S)\right) \quad 4.92$$

Após encontrar o perfil otimizado da variável de controle u , para $t_s = 3,8781$, obtemos $P(t_f) = 6,0835$ g/L. Os tempos de transição entre a primeira e segunda fase, $t_{1 \rightarrow 2}$, e entre a terceira e quarta fase, $t_{3 \rightarrow 4}$, são obtidos por simples busca e são coerentes aos tempos relatos por Srinivasan *et al.* (2003) como podemos observar na Tabela 4.7 e nas Figuras 4.13 e 4.14. No entanto para $P(t_f)$, o valor apresentado na referência não está coerente com o perfil que a mesma apresenta como solução ótima, que se obtém $P(t_f) = 6,49$ g/L. Contudo, este valor é obtido com a violação da restrição $S(t_f) = S_e$, pois $S(t_f) = 0,2480$ g. O valor apresentado por Srinivasan *et al.* (2003) para $P(t_f)$ é o mesmo apresentado por Visser *et al.* (2000) para esta mesma formulação do problema, porém com parâmetros, condições iniciais, tempo final e número e sequência de fases diferentes. Portanto, a diferença do valor de $P(t_f)$

apresentado na Tabela 4.7 não deve ser considerada como relevante, devido a não coerência deste valor com a solução apresentada por Srinivasan *et al.* (2003). As tolerâncias relativa e absoluta utilizadas no integrador foram, respectivamente, 10^{-6} e 10^{-8} e a tolerância utilizada no otimizador foi 10^{-7} .

Tabela 4.7: Comparação entre resultados obtidos.

	$t_{1 \rightarrow 2}$	t_s	$t_{3 \rightarrow 4}$	$P(t_f)$
Srinivasan <i>et al.</i> (2003)	0,862	3,83	5,385	8,2 g/L*
Este trabalho	0,861	3,8781	5,429	6,1 g/L

* este valor não deve ser considerado nesta avaliação, por contradizer com a solução apresentada pela referência.

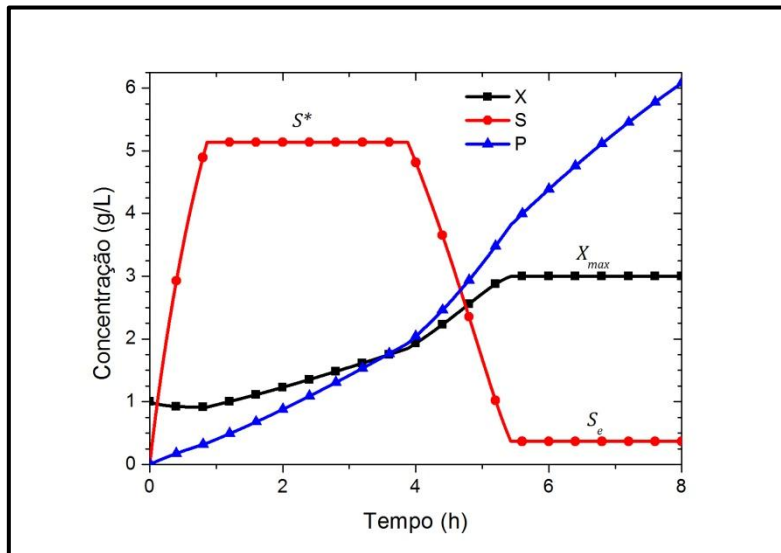


Figura 4.13: Perfis de Concentração da Biomassa (X), Substrato (S) e Produto (P).

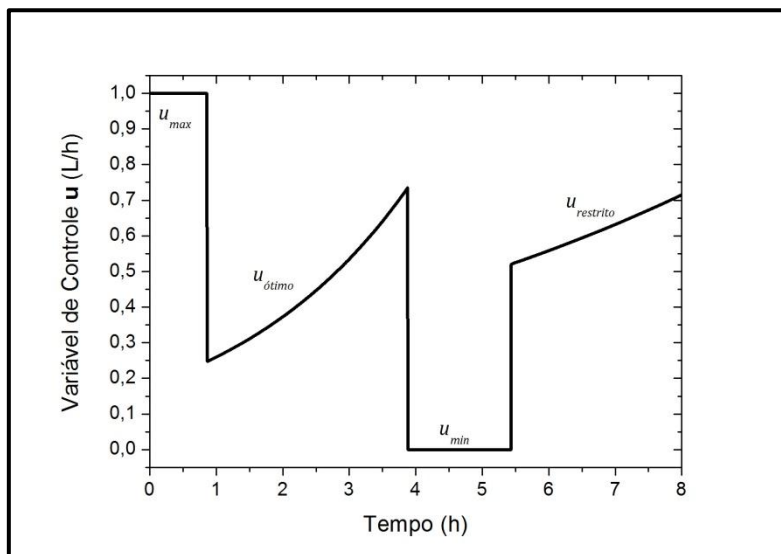


Figura 4.14: Ação de Controle.

4.3.2. Reator semi-batelada não-isotérmico com reações em série e restrição de remoção de calor

A reação $A + B \rightarrow C \rightarrow D$ semi-batelada exotérmica opera em um reator com uma camisa de resfriamento para que a temperatura possa ser ajustada rapidamente (Srinivasan *et al.*, 2003). O objetivo deste problema é maximizar a produção de C no tempo final, manipulando a taxa de alimentação de B e a temperatura do reator (T), por esta razão o balanço de energia não é apresentado no modelo matemático que é apresentado a seguir:

$$\frac{dc_A}{dt} = -k_1 c_A c_B - \frac{u}{V} c_A, \quad c_A(0) = c_{A0} \quad 4.93$$

$$\frac{dc_B}{dt} = -k_1 c_A c_B + \frac{u}{V} (c_{Bin} - c_B), \quad c_B(0) = c_{B0} \quad 4.94$$

$$\frac{dc_C}{dt} = k_1 c_A c_B - k_2 c_C - \frac{u}{V} c_C, \quad c_C(0) = c_{C0} \quad 4.95$$

$$\frac{dV}{dt} = u, \quad V(0) = V_0 \quad 4.96$$

com $k_1 = k_{10} e^{-\frac{E_1}{RT}}$, $k_2 = k_{20} e^{-\frac{E_2}{RT}}$. Onde c_X são as concentrações das espécies A , B , e C , respectivamente; T é a temperatura do reator; u é taxa de alimentação do componente B com concentração c_{Bin} ; V é o volume do reator; q_{rx} é a taxa de produção de calor; k_{10} e k_{20} são os fatores pré-exponenciais; E_1 e E_2 , energias de ativação; constantes dos gases; ΔH_1 e ΔH_2 , entalpias de reação.

O modelo reduzido é dado por:

$$\frac{dx_1}{dt} = -k_1 x_1 c_B, \quad x_1(0) = V_0 c_{A0} \quad 4.97$$

$$\frac{dx_2}{dt} = k_2 (x_1 - x_2), \quad x_2(0) = V_0 (c_{A0} + c_{C0}) \quad 4.98$$

$$\frac{dx_3}{dt} = u, \quad x_3(0) = V_0 \quad 4.99$$

onde $x_1 = V c_A$, $x_2 = V (c_A + c_C)$, $x_3 = V$ e

$$c_B = \frac{1}{x_3} (c_{Bin} x_3 + x_1 + V_0 (c_{B0} - c_{A0} - c_{Bin})) \quad 4.100$$

E a formulação do problema de otimização é:

$$\max_{u(t), T(t)} J = c_C(t_f) V(t_f) \quad 4.101$$

sujeito a:

Equações 4.97 a 4.100

$$\begin{aligned}
T_{min} &\leq T(t) \leq T_{max}, \\
u_{min} &\leq u(t) \leq u_{max}, \\
(-\Delta H_1)k_1c_Ac_BV + (-\Delta H_2)k_2c_CV &\leq q_{rx,max}, \\
V(t_f) &\leq V_{max}
\end{aligned}
\tag{4.102}$$

Os parâmetros e as condições operacionais são apresentados na Tabela 4.8.

Tabela 4.8: Condições Iniciais e Constantes Utilizadas.

Variáveis	Valores
k_{10}	4 L/mol h
k_{20}	800 L/h
E_1	6E3 J/mol
E_2	2E4 J/mol
R	8,31 J/mol K
ΔH_1	-3E-4 J/mol
ΔH_2	-1E-4 J/mol
u_{min}	0 L/h
u_{max}	1 L/h
T_{min}	20 °C
T_{max}	50 °C
V_{max}	1,1 L
$q_{rx,max}$	1,5E5 J/h
c_{A0}	10 mol/L
c_{B0}	1,1685 mol/L
c_{C0}	0 mol/L
V_0	1 L
c_{Bin}	20 mol/L
t_f	0,5 h

Os tipos de arcos são obtidos pela determinação das matrizes \mathcal{M}_u e \mathcal{M}_T para as duas variáveis de entrada:

$$\begin{aligned}
\mathbf{F} &= \begin{bmatrix} -k_1c_Ac_BV \\ -k_2c_CV \\ u \end{bmatrix}, \\
\mathbf{F}_u &= \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \Delta\mathbf{F}_u = \begin{bmatrix} k_1c_A(c_{Bin} - c_B) \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \\
\Delta^2\mathbf{F}_u &= \begin{bmatrix} k_1^2c_A^2c_{Bin} \\ k_1k_2c_A(c_{Bin} - c_B) \\ 0 \end{bmatrix} + \left(\frac{E_1\dot{T}}{RT^2} - \frac{2u}{V} \right) \Delta\mathbf{F}_u, \\
\mathbf{F}_T &= \frac{V}{RT^2} \begin{bmatrix} E_1k_1c_Ac_B \\ E_2k_2c_C \\ 0 \end{bmatrix}, \\
\Delta\mathbf{F}_T &= -\frac{V}{RT^2} \begin{bmatrix} 0 \\ k_1k_2c_Ac_B(E_1 - E_2) \\ 0 \end{bmatrix} - \frac{V\dot{T}}{R^2T^4} \begin{bmatrix} E_1k_1c_Ac_B(E_1 - 2RT) \\ E_2k_2c_C(E_2 - 2RT) \\ 0 \end{bmatrix} + \frac{E_1u}{RT^2} \Delta\mathbf{F}_u
\end{aligned}
\tag{4.103}$$

Ao verificarmos a matriz $\mathcal{M}_u = [\mathbf{F}_u \ \Delta\mathbf{F}_u \ \Delta^2\mathbf{F}_u]$, observamos que o seu *rank* estrutural é igual a 3, no entanto é independente de u , sendo definida pelos seus valores de contorno e pela restrição. Derivando restrição da taxa de produção de calor, $u_{restrito}$ é obtido:

$$u_{restrito} = V \frac{(-\Delta H_1)k_1^2 c_A c_B (c_A + c_B) - (-\Delta H_2)k_2 (k_1 c_A c_B - k_2 c_C)}{(-\Delta H_1)k_1 c_A (c_{Bin} - c_B)} - \frac{V\dot{T} (-\Delta H_1)E_1 k_1 c_A c_B + (-\Delta H_2)E_2 k_2 c_C}{RT^2 (-\Delta H_1)k_1 c_A (c_{Bin} - c_B)} \quad 4.104$$

Para a matriz \mathcal{M}_T , como T aparece explícito em \mathbf{F}_T ($\sigma_T = 0$), deveríamos obter $\Delta\mathbf{F}_T$ e $\Delta^2\mathbf{F}_T$ e a trajetória ótima para \mathbf{F}_T seria função de sua derivada segunda ($\rho_T = 3$, $\rho_T - \sigma_T - 1 = 2$), conforme a Seção 2.4.2. No entanto, a matriz perde *rank* em $\Delta\mathbf{F}_T$ ($\rho_T = 2$) não sendo mais necessário a obtenção de $\Delta^2\mathbf{F}_T$. Assim a trajetória ótima é calculada pelo determinante das duas primeiras linhas de $\mathcal{M}_T = [\mathbf{F}_T \ \Delta\mathbf{F}_T]$, que é função da derivada primeira de T ($\rho_T - \sigma_T - 1 = 1$):

$$\frac{dT_{ótimo}}{dt} = -\frac{RT^2 k_1 c_A c_B}{E_2 c_C} - \frac{RT^2 (c_{Bin} - c_B) u}{c_B (E_1 - E_2) V} \quad 4.105$$

Segundo Srinivasan *et al.* (2003), a condição inicial de c_B é tal que $q_{rx}(0) = q_{rx,max}$, e $u_{restrito}$ é aplicado para que se mantenha esta restrição. Uma vez que o volume máximo é atingido, a alimentação é anulada e a temperatura inicial é máxima para favorecer a reação. Assim, este problema pode ser dividido em três fases:

- Primeira fase: inicialmente, ambas variáveis de controle estão em suas restrições.
- Segunda fase: somente a restrição da produção de calor está ativa e a variável de controle T está em sua trajetória ótima.
- Terceira fase: mantém-se a trajetória ótima de T com a restrição do volume ativa.

Desta forma, somente o tempo de chaveamento entre a primeira e segunda fase, t_T , é a variável de otimização, na qual o objetivo é assegurado. O tempo de chaveamento entre a segunda e terceira fase, t_u , é obtido por simples busca nos resultados. Assim as funções de regularização são dadas por:

$$\eta_1 = \frac{1 + \tanh\left(\frac{V - V_{max}}{\xi}\right)}{2} \quad 4.106$$

$$\eta_2 = \frac{1 + \tanh\left(\frac{t - t_T}{\xi}\right)}{2} \quad 4.107$$

onde $\xi = 10^{-5}$.

As variáveis de controle regularizadas são:

$$u = (1 - \eta_1) \cdot u_{restrito} + \eta_1 \cdot u_{min} \quad 4.108$$

$$\frac{dT}{dt} = \eta_2 \frac{dT_{ótimo}}{dt} \quad 4.109$$

Os resultados obtidos são coerentes com os obtidos por Srinivasan *et al.* (2003), e são apresentados na Tabela 4.9 e nas Figuras 4.15 e 4.16 a seguir. As tolerâncias relativa e absoluta utilizadas no integrador foram 10^{-12} e 10^{-9} , respectivamente, e a tolerância utilizada no otimizador foi 10^{-7} .

Tabela 4.9: Comparação entre resultados obtidos.

	t_T	t_u	$n_C(t_f)$
Srinivasan <i>et al.</i> (2003)	0,05 h	0,3185 h	2,02 mol
Este trabalho	0,048 h	0,3131 h	2,0167 mol

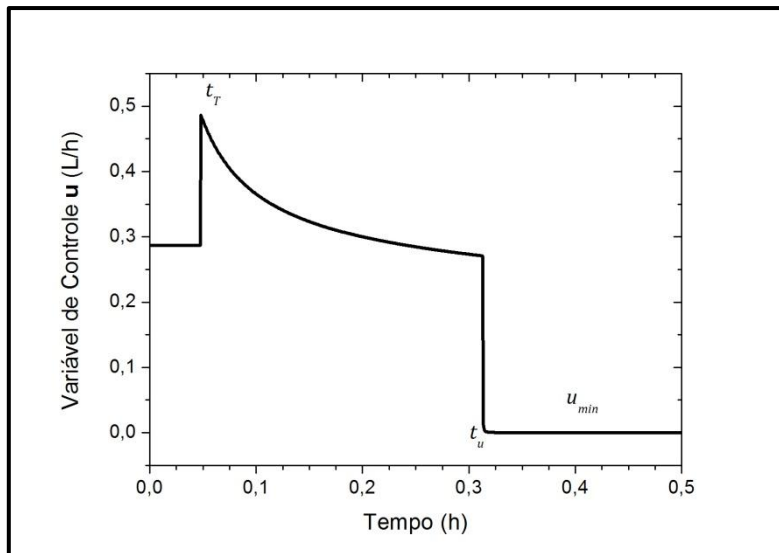


Figura 4.15: Perfil da Variável de Controle u

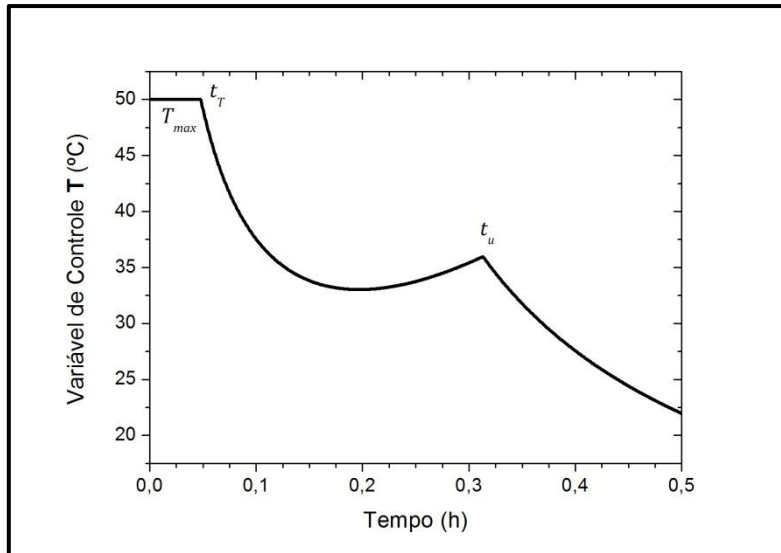


Figura 4.16: Perfil da Variável de Controle T .

4.4. Problemas de Otimização com Trajetória Viável Estendida

4.4.1. Problema de Controle Ótimo com Restrições de Desigualdade nas Variáveis de Estado

Este problema foi originalmente apresentado por Jacobson e Lele (1969) e consiste na minimização da variável de estado x_3 no tempo final ($t_f = 1$), manipulando a variável de controle $u(t)$ que está limitada entre -3,0 e 20, respectivamente. O problema completo é apresentado abaixo:

$$\min_{u(t)} J = x_3(t_f) \quad 4.110$$

sujeito a:

$$\frac{dx_1}{dt} = x_2, \quad x_1(0) = 0 \quad 4.111$$

$$\frac{dx_2}{dt} = -x_2 + u(t), \quad x_2(0) = -1 \quad 4.112$$

$$\frac{dx_3}{dt} = x_1^2 + x_2^2 + \frac{u(t)^2}{200}, \quad x_3(0) = 0 \quad 4.113$$

$$g(x_2, u, t) = x_2(t) - 8 \cdot \left(t - \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{1}{2} \leq 0 \quad 4.114$$

$$u_{min} \leq u(t) \leq u_{max} \quad 4.115$$

Primeiramente, vamos calcular $u_{ótimo}$ através da matriz

$$\mathcal{M} = [F_u \quad \Delta F_u \quad \Delta^2 F_u]:$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{F} &= \begin{bmatrix} x_2 \\ -x_2 + u(t) \\ x_1^2 + x_2^2 + \frac{u(t)^2}{200} \end{bmatrix}, & \mathbf{F}_u &= \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{u}{100} \end{bmatrix}, \\
\Delta \mathbf{F}_u &= \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ -2x_2 + \frac{1}{100} \frac{du}{dt} \end{bmatrix}, & \Delta^2 \mathbf{F}_u &= \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ -2u + 2x_1 + \frac{1}{100} \frac{d^2u}{dt^2} \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{4.116}$$

A matriz \mathcal{M} possui posto estrutural $\rho = 3$ e como u aparece explicitamente em \mathbf{F}_u ($\sigma = 0$), a trajetória ótima de u é função de sua derivada segunda, conforme visto na Seção 2.4.2. Desta forma, como as condições iniciais tanto de u quanto de $\frac{du}{dt}$ são desconhecidas, elas passam a serem variáveis passíveis de otimização. Desta forma calculando a $\det(\mathcal{M}) = 0$, temos:

$$\frac{d^2u}{dt^2} - \frac{du}{dt} + 200(x_1 + x_2 - u) = 0 \tag{4.117}$$

Definindo uma nova variável de controle w , obtemos as equações que definem a variável de controle u :

$$\frac{du}{dt} = w, \quad u(0) = u_0 \tag{4.118}$$

$$\frac{dw}{dt} = w - 200(x_1 + x_2 - u), \quad w(0) = w_0 \tag{4.119}$$

A ativação da restrição provoca no sistema, além da descontinuidade, uma mudança do índice diferencial do problema, que passa a ser de índice 2. Desta forma, a restrição será convertida em uma função algébrica regularizada apenas nas variáveis de controle u e w . A partir da derivação e manipulação da restrição obtemos $u_{restrito}$, $w_{restrito}$ e suas derivadas:

$$\begin{aligned}
u_{restrito} &= 8(t^2 + t) + \frac{13}{2} \\
\frac{du_{restrito}}{dt} &= w_{restrito} = 16t + 8 \\
\frac{dw_{restrito}}{dt} &= 16
\end{aligned} \tag{4.120}$$

Para o uso da regularização neste exemplo, precisamos apenas de uma variável de regularização:

$$\eta = \frac{1 + \tanh\left(\frac{g(x_2, u, t)}{\xi}\right)}{2} \quad 4.121$$

onde $\xi = 5 \cdot 10^{-4}$.

As equações 4.118 e 4.119 regularizadas são apresentadas a seguir:

$$\frac{du}{dt} = (1 - \eta) \cdot w + \eta \cdot (16t + 8) \quad 4.122$$

$$\frac{dw}{dt} = (1 - \eta) \cdot (w - 200(x_1 + x_2 - u)) + \eta \cdot (16) \quad 4.123$$

Desta forma, um problema que foi resolvido por Souza (2007) utilizando perfil inicial da variável de controle discretizada em 14 elementos, com tempo de cada intervalo variável, ou seja, um total de 27 variáveis de otimização, por esta abordagem pode ser solucionado com apenas 2 variáveis de otimização e sem flutuação de índice, uma vez que o índice foi reduzido a zero. Os valores encontrados são $u_0 = 14,0130$, $w_0 = -199,5608$ e $x_3(t_f) = 0,170436$, no qual Vassiliadis (1993) obteve $x_3(t_f) = 0,17989$ e Souza (2007), $x_3(t_f) = 0,1706$. Os resultados são apresentados nas Figuras 4.17 a 4.20 e as tolerâncias relativa e absoluta utilizadas no integrador foram 10^{-12} e 10^{-7} , respectivamente, e a tolerância utilizada no otimizador foi 10^{-6} .

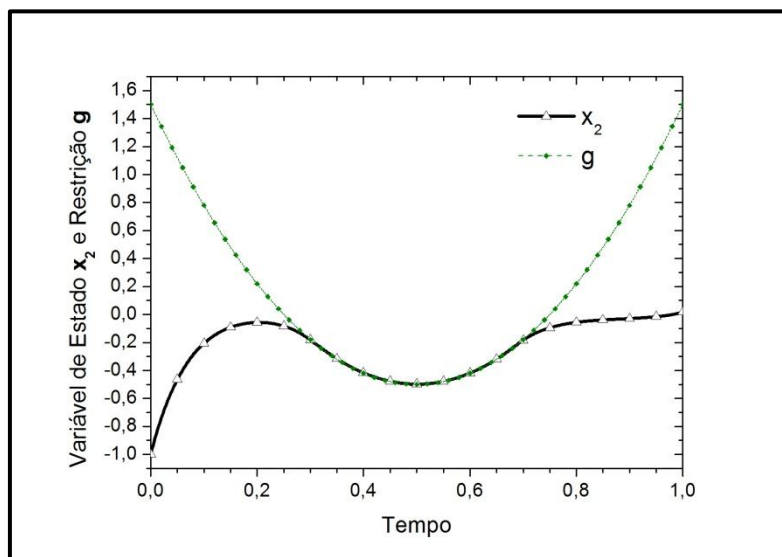


Figura 4.17: Resultados Obtidos para Variável de Estado x_2 .

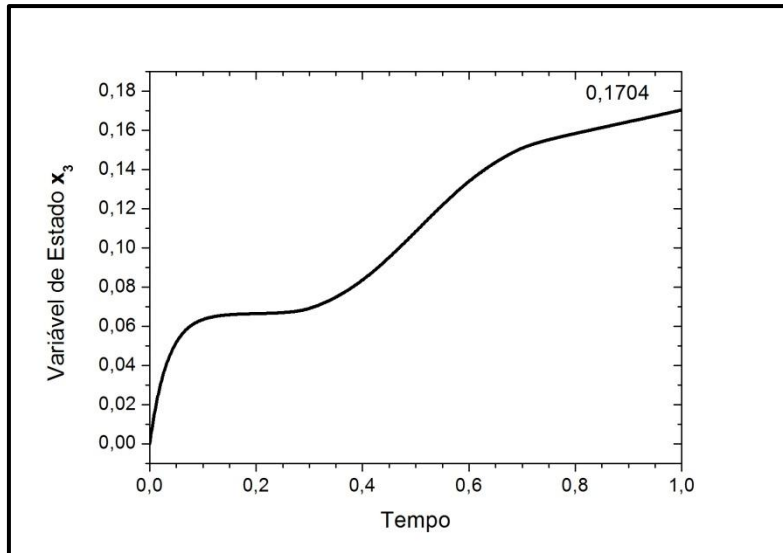


Figura 4.18: Resultados Obtidos para Variável de Estado x_3 .

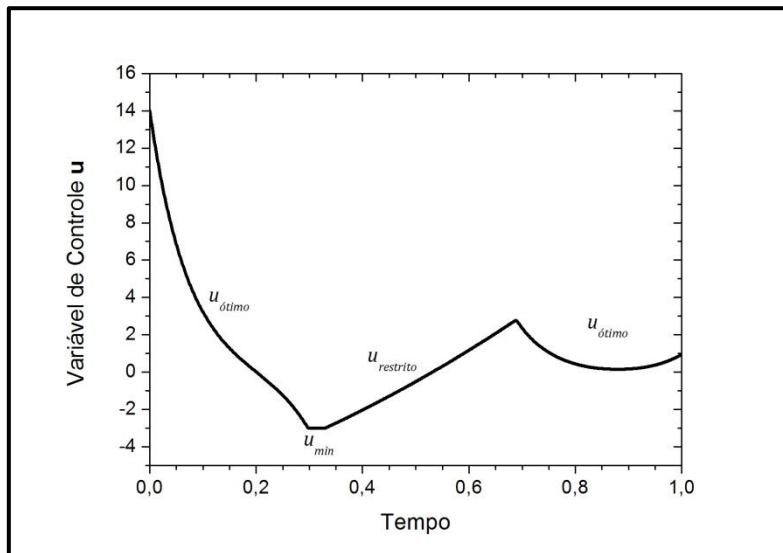


Figura 4.19: Resultados Obtidos para Variável de Controle u .

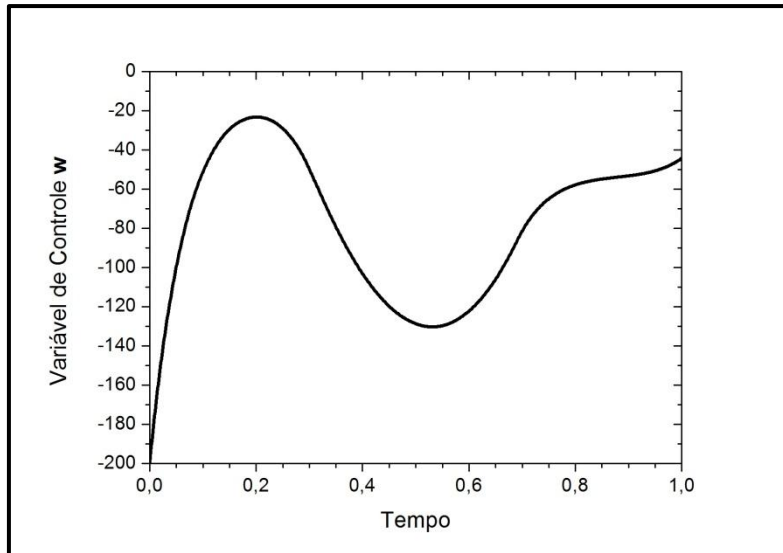


Figura 4.20: Resultados Obtidos para Variável de Controle w.

4.4.2. Oscilador de Van der Pol com Restrição de Desigualdade na Variável de Estado

Este problema foi apresentado por Vassiliadis *et al.* (1994b) e consiste na minimização da variável x_3 no tempo final ($t_f = 5$), manipulando a variável de controle u , limitada entre -0,3 e 1,0. O problema ainda apresenta uma restrição de desigualdade na variável de estado x_1 que pode elevar o índice diferencial do sistema para 2. A formulação completa do problema é dada a seguir:

$$\min_{u(t)} J = x_3(t_f) \quad 4.124$$

sujeito a:

$$\frac{dx_1}{dt} = (1 - x_2^2) \cdot x_1 - x_2 + u, \quad x_1(0) = 0 \quad 4.125$$

$$\frac{dx_2}{dt} = x_1, \quad x_2(0) = 1 \quad 4.126$$

$$\frac{dx_3}{dt} = x_1^2 + x_2^2 + u^2, \quad x_3(0) = 0 \quad 4.127$$

$$g(x_1) = -x_1 - 0,4 \leq 0 \quad 4.128$$

$$u_{min} \leq u(t) \leq u_{max} \quad 4.129$$

Como nos exemplos anteriores, através da matriz $\mathcal{M} = [F_u \quad \Delta F_u \quad \Delta^2 F_u]$ vamos calcular $u_{\text{ótimo}}$:

$$\begin{aligned} F &= \begin{bmatrix} (1 - x_2^2) \cdot x_1 - x_2 + u \\ x_1 \\ x_1^2 + x_2^2 + u^2 \end{bmatrix}, & F_u &= \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 2u \end{bmatrix}, \\ \Delta F_u &= \begin{bmatrix} -1 + x_2^2 \\ -1 \\ -2x_1 + 2 \frac{du}{dt} \end{bmatrix}, & \Delta^2 F_u &= \begin{bmatrix} -2x_2^2 + x_2^4 \\ 1 - x_2^2 \\ 4x_2 - 2u + 2 \frac{d^2u}{dt^2} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad 4.130$$

Como a matriz \mathcal{M} também possui posto estrutural $\rho = 3$ e como u aparece explicitamente em F_u (logo, $\sigma = 0$), a trajetória ótima de u é função de sua derivada segunda e as condições iniciais tanto de u quanto de $\frac{du}{dt}$ são variáveis passíveis de otimização. Desta forma, calculando a $\det(\mathcal{M}) = 0$, temos:

$$\frac{d^2u}{dt^2} + 2x_2(1 + x_1^2(1 - x_2^2)) = 0 \quad 4.131$$

Definindo uma nova variável de controle w , obtemos as equações que definem a variável de controle u :

$$\frac{du}{dt} = w, \quad u(0) = u_0 \quad 4.132$$

$$\frac{dw}{dt} = -2x_2(1 + x_1^2(1 - x_2^2)), \quad w(0) = w_0 \quad 4.133$$

O índice diferencial do problema passa a ser de índice 2 quando a restrição está ativa. Desta forma, a restrição será convertida em uma função algébrica regularizada apenas nas variáveis de controle u e w . A partir da derivação e manipulação da restrição obtemos u_{restrito} , w_{restrito} e suas derivadas:

$$\begin{aligned} u_{\text{restrito}} &= x_2 - (1 - x_2^2) \cdot x_1 \\ \frac{du_{\text{restrito}}}{dt} &= w_{\text{restrito}} = 2x_1^2x_2 + x_1 \\ \frac{dw_{\text{restrito}}}{dt} &= 2x_1^3 \end{aligned} \quad 4.134$$

Para o uso da regularização neste exemplo, precisamos apenas de uma variável de regularização:

$$\eta = \frac{1 + \tanh\left(\frac{g(x_1)}{\xi}\right)}{2} \quad 4.135$$

onde $\xi = 10^{-4}$.

As Equações 4.118 e 4.119 regularizadas são apresentadas a seguir:

$$\frac{du}{dt} = (1 - \eta) \cdot w + \eta \cdot (2x_1^2 x_2 + x_1) \quad 4.136$$

$$\frac{dw}{dt} = (1 - \eta) \cdot (-2x_2(1 + x_1^2(1 - x_2^2))) + \eta \cdot (2x_1^3) \quad 4.137$$

Este problema também foi resolvido por Souza (2007) utilizando perfil inicial da variável de controle discretizada em 14 elementos, com tempo de cada intervalo variável. Como no exemplo anterior, nesta abordagem o problema pode ser solucionado com apenas 2 variáveis de otimização e sem flutuação de índice. Os valores encontrados são $u_0 = -0,164412$, $w_0 = 2,137116$ e $x_3(t_f) = 2,973315$, cerca de 0,5% maior do que Souza (2007), que obteve $x_3(t_f) = 2,9591$. Essa diferença nos valores se deve à tolerância do integrador utilizado, que se mostrou ser inadequado para este problema especificamente. Os resultados são apresentados nas Figuras 4.21 a 4.23. As tolerâncias relativa e absoluta utilizadas no integrador foram 10^{-8} e 10^{-6} , respectivamente, e a tolerância utilizada no otimizador foi 10^{-8} .

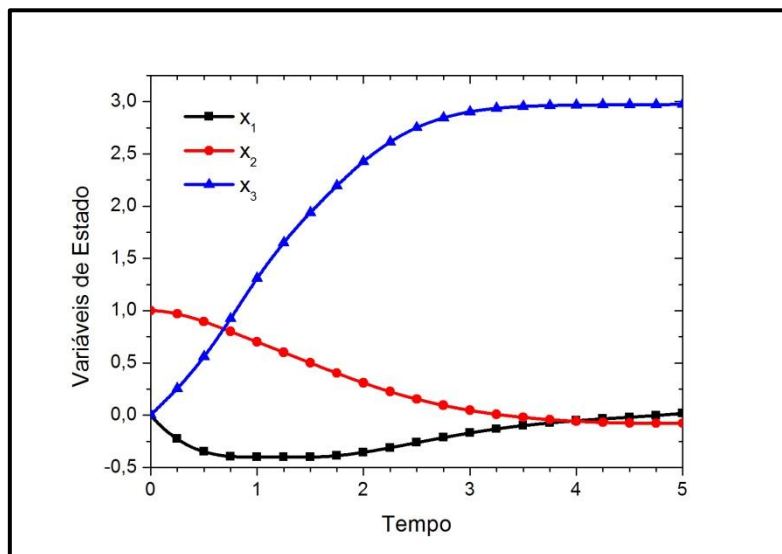


Figura 4.21: Resultados Obtidos para Variáveis de Estado.

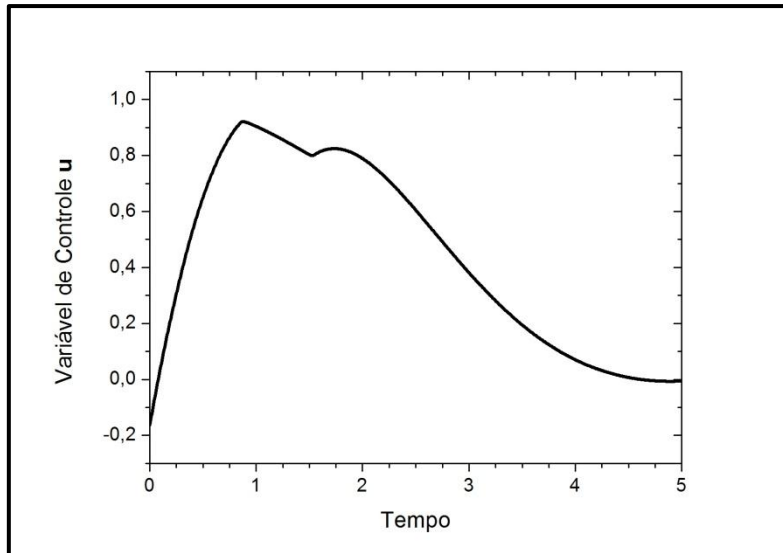


Figura 4.22: Resultados Obtidos para Variável de Controle u .

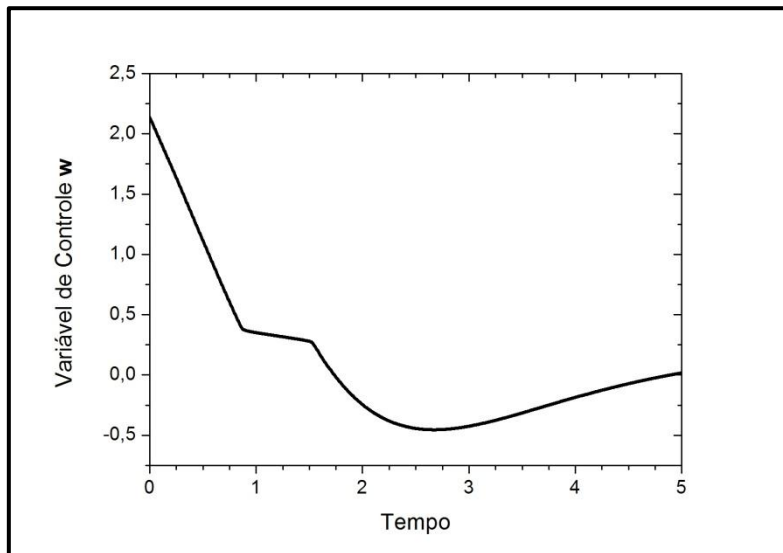


Figura 4.23: Resultados Obtidos para Variável de Controle w .

CAPÍTULO V

CONCLUSÕES

RESUMO

Este capítulo apresenta sumariamente as conclusões da aplicação da metodologia proposta nesta dissertação.

A abordagem algébrico-diferencial de problemas de otimização dinâmica já vem sendo considerada em sua resolução numérica com vantagens consideráveis. Pois permite em sua formulação a inclusão automática das restrições algébricas do problema, evitando a tarefa tediosa de manipulações das equações de modo a transformar o problema original em um problema de natureza puramente diferencial. Vantagens da abordagem são bem evidenciadas na revisão bibliográfica apresentada na dissertação, onde se podem verificar os diversos avanços na busca da solução do problema de otimização dinâmica bem como metodologias consagradas na resolução dos mesmos e as dificuldades inerentes as suas aplicações. Um novo aspecto inerente à formulação algébrico-diferencial do problema de otimização dinâmica é a possibilidade de, devido à possível existência de restrições de desigualdade das variáveis de estado e/ou de controle do problema, ocorrer ao longo da trajetória ótima variação do índice diferencial do sistema, denominado no presente trabalho de sistemas algébrico-diferenciais com *índice flutuante*. Sistemas desse tipo vêm sendo tratados através de técnicas de redução do índice diferencial que, além de demandarem manipulações algébricas das equações do sistema, produzem descontinuidades em sua estrutura obrigando a reinicializações dos procedimentos numéricos cada vez que uma das restrições é atingida.

Neste trabalho propôs-se uma nova sistemática nos estudos de otimização dinâmica de sistemas descritos por equações algébrico-diferenciais, destacando-se no procedimento dois aspectos implementacionais. No primeiro, automatiza-se a eliminação das variáveis adjuntas da formulação rigorosa do problema de otimização dinâmica dando origem a restrições algébricas ou diferenciais que estabelecem a lei de controle ótimo correspondente. O segundo aspecto de implementação da metodologia se relaciona à regularização das descontinuidades advindas da variação do índice diferencial do sistema ao longo da trajetória ótima. Nesta etapa, são empregadas metodologias analíticas associadas a funções regularizadoras que permitiram transpor as descontinuidades sem a necessidade de reinicialização do sistema, conforme apresentado no Capítulo 3.

A contribuição mais significativa deste trabalho foi a implementação de uma técnica de eliminação das variáveis adjuntas associadas à formulação rigorosa de problemas de otimização dinâmica acoplada ao emprego de funções de regularização das restrições de desigualdade relativas às variáveis de controle e de estado do problema. A aplicação do procedimento a diferentes exemplos ilustrativos demonstraram sua simplicidade implementacional, além de manter a dimensão do problema original. A busca dos perfis temporais ótimos se limitou ao emprego de

técnicas simples de otimização, tipo *line search*. A natureza inerentemente algébrico-diferencial da nova formulação apresenta as limitações inerentes a este tipo de abordagem, exigindo a determinação de condições iniciais consistentes.

A aplicação da metodologia a alguns exemplos clássicos permitiu validar a técnica proposta e confrontar os resultados encontrados com os reportados na literatura. Tendo sido demonstrada, em todos os casos estudados, a sua plena abrangência. Nos casos abordados, obteve-se sucesso nas soluções ótimas e os valores obtidos foram ora concordantes ora superiores aos resultados apresentados pela literatura.

Baseados nos resultados obtidos, as seguintes conclusões foram obtidas ao aplicar a metodologia proposta: (i) viabilização da resolução contínua do sistema mesmo após a ativação das restrições de desigualdade, evitando o procedimento tedioso de reinicialização do sistema com novas determinações de condições iniciais consistentes; (ii) a metodologia é de fácil entendimento e implementação, se comparada a outras técnicas de manipulação de restrições em problemas de otimização dinâmica.

Um dos aspectos mais importantes observados foi a capacidade apresentada pela metodologia desenvolvida em automatizar a passagem do problema de otimização propriamente dito ao problema de simples simulação, comandado pela ativação da restrição atingida. Associando o conhecimento da trajetória ótima de u ao uso de função regularizadora, podemos ainda perceber que: (i) nos casos onde a restrição está no interior da região de busca ou durante toda a trajetória (Casos 4.1.1 e 4.1.2), o problema de otimização dinâmica transforma-se em uma simulação dinâmica, ou uma “simples” integração, pois não há necessidade de parametrizar a variável de controle; (ii) nos casos onde a restrição está no final do intervalo (Caso 4.2.1), ou seja, o problema ainda é de valor no contorno, devemos determinar o tempo de chaveamento para atendê-la; (iii) nos casos onde existe uma sequência de fases (Casos 4.2.2, 4.3.1 e 4.3.2), que podem ser definidas por otimização, também devemos determinar o tempo de chaveamento para atender a função objetivo; (iv) e, finalmente, nos casos onde a trajetória ótima de u é função de suas derivadas (Casos 4.4.1 e 4.4.2), temos que determinar suas condições iniciais através de otimização, que para os dois casos estudados, a aplicação do procedimento ocasionou na transformação do sistema de EADs em um de EDOs.

Aspectos como a obtenção de estimativas iniciais para a otimização e o desempenho do integrador não fizeram parte das análises realizadas, visto que o principal foco desta dissertação foi a construção de um algoritmo que pudesse ser

aplicado a diversos problemas de otimização dinâmica, deixando a cargo do usuário a escolha do integrador e o método de otimização, ressaltando que o integrador deve ser capaz de solucionar problemas de índice diferencial superior. Outro aspecto que deve ser mencionado é relacionado à dimensão dos exemplos ilustrativos, pois a aplicação com sucesso da metodologia limita-se a problemas de dimensões não elevadas, pois a determinação das expressões analíticas das trajetórias ótimas em problemas que possuam um número elevado de variáveis de estado e controle torna-se inviável.

A seguir são apresentadas sugestões para trabalhos futuros:

- Aprimoramento do algoritmo, principalmente em problemas cuja trajetória ótima é função das derivadas da variável de controle, apresentando uma grande sensibilidade às condições iniciais;
- E aplicação em outros integradores e rotinas de otimização.
- Implementação de diferenciação automática e simbólica ao procedimento;

O aprimoramento do algoritmo pode tornar a metodologia menos sensível aos parâmetros de integradores e rotinas de otimização, que não foram foco desta dissertação, permanecendo na maioria dos casos constantes. Somente quando ocorria algum erro na integração ou na otimização, estes parâmetros foram modificados.

A incorporação de diferenciação automática e simbólica na metodologia poderá tornar a aplicação ainda mais simples, pois transporta a análise e a solução, o que ainda é realizado em etapas diferentes da resolução, para apenas um ambiente de programação.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ALMEIDA NETO, E., SECCHI, A. R., 2006, "Dynamic Real-Time Optimization of a FCC Converter Unit", *International Symposium on Advanced Control of Chemical Processes*, ADCHEM, pp. 1055–1061.
- ASCHER, U. M., SPITERI, R. J., 1995, "Collocation Software for Boundary Value Differential-Algebraic Equations". *Manual - University of British Columbia*, Canada.
- ASCHER, U. M., SPITERI, R., 1994, "Collocation software for boundary-value differential algebraic equations". *SIAM J. Scient. Comput.*, v. 15, p. 938–952.
- BADER, G., ASCHER, U. M., 1987, "A new basis implementation for mixed order boundary value ODE solver". *SIAM J. Sci. Comput.*, v.8, pp. 483–500.
- BELL, M. L., SARGENT, R., 2000, "Optimal control of inequality constrained DAE systems". *Computers and Chemical Engineering*, v. 24, pp. 2385–2404.
- BELLMAN, R., GLICKSBERG, I., GROSS, O., 1956, "On the Bang-Bang control problem". *Quarterly of Applied Mathematics*. vol 14, pp. 11–18.
- BETTS, J. T., 2001, "Practical Methods for Optimal Control Using Nonlinear Programming". *Advances in Design and Control 3*, SIAM, Philadelphia, U.S.A.
- BIEGLER, L. T., 1984, "Solution of Dynamic Optimization Problems by Successive Quadratic Programming and Orthogonal Collocation", *Computers and Chemical Engineering*, v. 8, n. 3/4, pp. 243–248.
- BIEGLER, L. T., 2007, "An overview of simultaneous strategies for dynamic optimization". *Chemical Engineering and Processing*, vol. 46, pp. 1043–1053.
- BIEGLER, L. T., CERVANTES, A. M., WÄCHTER, A., 2002, "Advanced in Simultaneous Strategies for Dynamic Process Optimization", *Chemical Engineering Science*, v. 57, pp. 575–593.
- BIEGLER, L. T., GROSSMANN, I. E., 2004, "Retrospective on Optimization", *Computers and Chemical Engineering*, v. 28, pp. 1169–1192.
- BOCK, H. G., 1983, "Recent advances in parameter identification techniques for ODE". In: *P. Deuhard and E. Hairer (eds). Numerical Treatment of Inverse Problems in Differential and Integral Equations*. Birkhäuser, Boston.

- BOCK, H. G., BAUER, I., LEINEWEBER, D. B., SCHLÖDER, J. P., 1999, "Direct multiple shooting methods for control and optimization of DAE in chemical engineering". In: F. keil, W. Mackens, H. Voss and J. Werther (eds), *Scientific Computing in Chemical Enginnering II*, vol.2, pp. 2–18, Berlin, Springer.
- BOCK, H. G., EICH, E., SCHLODER, J. P., 1988, "Numerical solution of constrained least squares boundary value problems in differential-algebraic equations". In: K. Strehmel (ed) *Numerical Treatment of Differential Equations*. Teubner, Leipzig.
- BOCK, H. G., PLITT, K. J., 1984, "A multiple shooting algorithm for direct solution of optimal control problems". *International Federation of Automatic Control*, 9th World Congress, Budapest.
- BRYSON JR., A. E., HO, Y.-C., 1969, ***Applied Optimal Control Optimization, Estimation, and Control***, Massachusetts, EUA, Blaisdell Publishing Company.
- BRYSON, A. E., HO, Y. C., 1975, ***Applied Optimal Control***. Washington DC, Hemisphere.
- ÇELİK, E.; KARADUMAN, E.; BAYRAM, M., 2003, "Numerical solution of chemical differential-algebraic equations". ***Applied Mathematics and Computation***, v. 139, pp. 259–264.
- CERVANTES, A.; BIEGLER, L., 1998, "Large scale DAE optimization using a simultaneous NLP formulation". ***AIChE Journal***, v. 44, n. 5, pp. 1038–1050.
- CHUDEJ, K.; GÜNTHER, M., 1999, "Global state space approach for the efficient numerical solution of state-constrained trajectory optimization problems". ***Journal of Optimization, Theory and Applications***, v. 103, pp. 75–93.
- CUTHREL, J., BIEGLER, L. T., 1987b, "Simultaneous solution and optimization of process flowsheets with differential equation models". ***Chem. Eng. Res. Des.***, v. 64, pp. 341–346, 1987.
- CUTHREL, J.; BIEGLER, L. T., 1987, "On the optimization of differential-algebraic process systems". ***AIChE Journal***, v. 33, n. 8, pp. 1257–1270.
- CUTHREL, J.; BIEGLER, L. T., 1989, "Simultaneous solution and optimization of process flowsheets with differential equation models". ***Chem. Eng. Res. Des.***, v. 64, pp. 341–346.
- CUTHRELL, J. E., 1986, *On the Optimization of Differential-Algebraic Systems of Equations in Chemical Enginnering*. Tese D.Sc., Carnegie Mellon University, Pittsburgh.

- FEEHERRY, W. F., 1998, *Dynamic optimization with path constraints*. Ph.D. dissertation, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, Massachusetts, USA.
- FEEHERRY, W. F., BARTON, P. I., 1996, "Dynamic Simulation and Optimization with Inequality Path Constraints". ***Computers chem. Engng***, vol. 20, suppl., pp. S707–S712.
- FEEHERRY, W. F.; BARTON, P. I., 1998, "Dynamic optimization with state variable path constraints". ***Computers Chemical Eng***, v. 22, n. 9, pp. 1241–1256.
- GANI, R., CAMERON, T., 1992, "Modelling for dynamic simulation of chemical processes- the index problem", ***Chem. Engng. Sci.***, v. 47, pp. 1311–1315.
- GATH, P. F., 2002, *CAMTOS - A Software Suite Combining Direct and Indirect Trajectory Optimization Methods*. Tese D.Sc., Universität Stuttgart.
- GEAR, C. W., 1971, "The simultaneous numerical solution of differential– algebraic equations". ***IEEE Transactions on Circuit Theory***, vol. 18, pp. 89–95.
- GILL, P. E., MURRAY, W., SAUNDERS, M. A., WRIGHT, M. H., 1986, "User's Guide for NPSOL 5.0: a Fortran package for nonlinear programming". Department of Mathematics, University of California, San Diego.
- GILL, P. E.; MURRAY, W.; SAUNDERS, M. A., 1997, "User's Guide for SNOPT 5.3: a Fortran Package for Large-Scale Nonlinear Programming". Department of Mathematics, University of California, San Diego.
- GOMES, E. O., 2000, *Abordagem algébrico diferencial na solução de problemas de controle ótimo*. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG, Brasil.
- HAMILTON, W. R., 1834, "On A General Method In Dynamics", ***Philosophical Transactions of the Royal Society***, part II, pp. 247–308.
- HONG, J., 1986, "Optimal Substrate Feeding Policy for a Fed Batch Fermentation with Substrate and Product Inhibition Kinetics", ***Biotechnology and Bioengineering***, v. 28, pp. 1421–1431.
- HUANG, Y. J., REKLAITIS, G. V., VENKATASUBRAMANIAN, V., 2002, "Model decomposition based method for solving general dynamic optimization problems", ***Computers and Chemical Engineering***, v. 26, pp. 863–873.
- JACOBSON, D. H., LELE, M. M., 1969, "A Transformation Technique for Optimal Control Problems with a State Variable Inequality Constraint", ***IEEE Trans. Autom. Control***, v. 14, pp. 457–464.

- KAMESWARAN, S., BIEGLER, L. T., 2006, "Simultaneous dynamic optimization strategies: Recent advances and challenges". **Computers and Chemical Engineering**, vol. 30, pp. 1560–1575.
- KIRK, D., 1970, **Optimal Control Theory: An Introduction**, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey.
- LASALLE, J. P., 1960, "The Time Optimal Control Problem", **Contributions to Theory of Non-linear Oscillations**, vol. 5, Princeton Univ. Press.
- LEFKOPOULOS, A., STADTHER, M., 1993, "Index analysis of unsteady-state chemical processes- I. an algorithm for problem formulation", **Computers chein. Engng.**, n. 17, pp. 399–413.
- LEINEWEBER, D. B., 1996, "The theory of MUSCOD in a nutshell". M.Sc. Dissertassion, University of Heidelberg.
- LEINEWEBER, D. B., 1999, "Efficient reduced SQP methods for the optimization of chemical processes described by large sparse DAE models". Tese D.Sc., University of Heidelberg.
- LOBATO, F. S., 2004, *Abordagem mista para problemas de otimização dinâmica*. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG, Brasil.
- LOGSDON, J. S.; BIEGLER, L. T., 1989, "Accurate solution of differential-algebraic optimization problems". **Ind Eng. Chem. Res.**, v. 28, pp. 1628–1639.
- LOGSDON, J. S.; BIEGLER, L. T., 1992, "Decomposition strategies for large-scale dynamic optimization problems". **Chemical Engineering Science**, v. 47, n. 4, pp. 851–864.
- LYNN, L. L., PARKIN, E. S., ZAHRADNIK, R. L., 1970, "Near-optimal control by trajectory approximation". **I&EC Fundamentals**, v. 9, n. 1, pp. 58–63.
- LYNN, L. L., ZAHRADNIK, R. L., 1987, "The use of orthogonal polynomials in the near-optimal control of distributed systems by trajectory approximation". **Int. J. Control**, v. 12, n. 6, p. 1079–1087.
- MARQUARDT, W., 1994, "Numerical methods for the simulation of differential algebraic process models", tech. rep., **Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen**.

- MATTSSON, S., SÖDERLIND, G., 1993, "Index reduction in differential-algebraic equations using dummy derivatives", **SIAM J. Sci. Stat. Comput.**, 14, pp. 677–92.
- MODAK, J. L., LIM, H. C., TAYLEB, Y. J., 1986, "General characteristics of optimal feed rate profiles for various fed-batch fermentation process". **Biotechnology and Bioengineering**, XXVIII, pp. 1396–1407.
- MURATA, V. V., BISCAIA Jr, E. C., 1997, "Structural and symbolic techniques for automatic characterization of differential–algebraic equations". **Computers and Chemical Engineering**, 21 (Suppl.), pp. 829–834.
- NEWMAN, C. P., SEN, A., 1974, "Weighted Residual Methods in Optimal Control", **IEEE Transactions on Automatic Control**, pp. 67–69.
- OBERLE, H. J.; SOTHMANN, B., 1999, "Numerical computation of optimal feed rates for a fed-batch fermentation model". **Journal of Optimization Theory and Applications**, v. 100, pp. 1–13.
- O'CONNOR, J. J., ROBERTSON, E. F., "The MacTutor History of Mathematics archive", 2010. Disponível em: <http://www-history.mcs.st-andrews.ac.uk/index.html>> Acesso em: Maio de 2010.
- OH, S. H., LUUS, R., 1977, "Use of orthogonal collocation method in optimal control problems". **Int. J. Control**, v. 26, pp. 657–673.
- PALANKI, S., KRAVARIS, C., WANG, H. Y., 1993, "Synthesis of state feedback laws for end-point optimization in batch processes". **Chem. Engng. Sci.**, 48, pp. 135–152.
- PALANKI, S., KRAVARIS, C., WANG, H. Y., 1994, "Optimal feedback control of batch reactors with a state inequality constraint and free terminal time". **Chem. Engng. Sci.**, 49, pp. 85.
- PANTELIDES, C. C., VASSILIADIS, V. S., SARGENT, R. W. H., 1994, "Optimal control of multistage systems described by high-index differential-algebraic equations". In: *Computational Optimal Control*, R. Bulirsch and D. Kraft, (eds.), Birkhäuser, Basel, Germany, pp. 177–191.
- PANTELIDES, C., 1988, "The consistent initialization of differential algebraic systems". **SIAM J. SCI. STAT. Compt.**, v. 9, pp. 213–231.

- PANTELIDES, C., GRITSIS, D., MORISON, K., SARGENT, R., 1988, "The mathematical modelling of transient systems using differential-algebraic equations", **Computers chem. Engng.**, 12, pp. 449–454.
- PETZOLD, L. R., 1989, *DASSL code*, version 1989, Computing and Mathematics Research Division, Lawrence Livermore National Laboratory, L316, PO Box 808, Livermore, CA 94559.
- PETZOLD, L., REN, Y., MALY, T., 1997, "Regularization of higher-index differential-algebraic equations with rank-deficient constraints", **SIAM J. Sci. Comput.**, 18, pp. 753–774.
- PFEIFER, A. A., 2007, "Controle Ótimo de Sistemas Algébrico-Diferenciais com Flutuação do Índice Diferencial". Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG, Brasil.
- PLITT, K. J., 1981, *Ein superlinear konvergentes Mehrziel verfahren zur direkten Berechnung beschränkter optimaler Steuerungen*. Diplomarbeit, Universität Bonn.
- POLLARD, G. P., SARGENT, R. W. H., 1970, "Off line Computation of Optimum Controls for a Plate Distillation Column", **Automatica**, v. 6, pp. 59–76.
- PONTON, J., GAWTHROP, P., 1991, "Systematic construction of dynamic models for phase equilibrium processes", **Computers chem. Engng.**, 15, pp. 803–808.
- PONTRYAGIN, L. S., BOLTYANSKII, V. G., GAMKRELIDZE, R. V., MISCHENSKO, Y.F., 1963, *The Mathematical Theory of Optimal Processes*, 1^o ed, Interscience, New York, EUA.
- PYTLAK, R., VINTER, R. B., 1996a, "A Feasible Directions Type Algorithm for Optimal Control Problems with State and Control Constraints: Convergence Analysis". *Technical report, Imperial College of Science, Technology and Medicine*, London, England.
- PYTLAK, R., VINTER, R. B., 1996b, "A Feasible Directions Type Algorithm for Optimal Control Problems with State and Control Constraints: Implementation. *Technical report, Imperial College of Science, Technology and Medicine*, London, England.
- RAHMAN, S., PALANKI, S., 1996, "State feedback synthesis for on-line optimization in the presence of measurable disturbances". **AICHE J.**, 42, pp. 2869–2882.
- RENFRO, J. G., 1986, "Computational studies in the optimization of systems described by differential-algebraic equations". Tese de D.Sc, University of Houston.

- RENFRO, J. G.; MORDSHEDI, A. M.; ASBJORSEN, O. A., 1987, "Simultaneous optimization solution of systems described by differential-algebraic equations". **Comput. and Chem. Engng.**, v. 11, pp. 503–517.
- RUPPEN, D., BONVIN, D., RIPPIN, D. W. T., 1998, "Implementation of adaptive optimal operation for a semi-batch reaction system". **Computers and Chemical Engineering**, v. 22, pp. 185–189.
- SAN, K. Y., STEPHANOPOULOS, G., 1984, "A note on the optimality criteria for maximum biomass production in a fed-batch fermenter". **Biotechnology and Bioengineering**, v. 26, p. 1261–1264.
- SARGENT, R. W. H., SULLIVAN, G. R., 1977, "The Development of an Efficient Optimal Control Package". In: *Proc. of the 8th IFIP Conf. on Optimisation Techniques Part 2*.
- SCHLEGEL, M, MARQUARDT, W, 2006, "Detection and exploitation of the control switching structure in the solution of dynamic optimization problems". **Journal of Process Control**, v.16, pp. 275–290.
- SCHLEGEL, M., STOCKMANN, K., BINDER, T., MARQUARDT, W., 2005, "Dynamic optimization using adaptive control vector parameterization", **Computers and Chemical Engineering**, v. 29, n. 8, pp. 1731–1751.
- SCHULZ, V. H., 1996, *Reduced SQP Methods for Large Scale Optimal Control Problems in DAE with Application to Path Planning Problems for Satellite Mounted Robots*. Tese D.Sc. Universität Heidelberg.
- SECCHI, A. R., LIMA, E. L., PINTO, J. C., 1990, "Constrained Optimal Batch Polymerization Reactor Control", **Polymer Engineering and Science**, vol. 30, n.19, pp. 1209–1219.
- SOUZA, D. F. S., 2007, *Abordagem algébrico-diferencial da otimização dinâmica de processos*. Tese de Doutorado, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- SRINIVASAN, B., AMRHEIN, M., BONVIN, D., 1998, "Reaction and flow variants/invariants in chemical reaction systems with inlet and outlet streams", **American Institute of Chemical Engineers Journal**, 44 (8), pp. 1858–1867.
- SRINIVASAN, B., PRIMUS, C. J., BONVIN, D., RICKER, N. L., 2001, "Run-to-run optimization via generalized constraint control". **Control Engineering Practice**, v. 9, pp. 911–919.

- SRINIVASAN, B.; PALANKI, S.; BONVIN, D., 2003, "Dynamic optimization of batch processes: I. characterization of the nominal solution". **Computers and Chemical Engineering**, v. 27, pp. 1–26.
- STRYK, O. V., SCHLEMMER, M., 1994, "Optimal control of the industrial robot manutec R3". **International Series of Numerical Mathematics**, v. 1, pp. 367–382.
- STRYK, O. VON., 1999, "User's Guide for DIRCOL - a Direct Collocation method for the numerical solution of optimal control problems". **Fachgebiet Simulation und Systemoptimierung (SIM)**. Technische Universität Darmstadt.
- TANARTKIT, P., BIEGLER, L. T., 1995, "Stable decomposition for dynamic optimization". **Ind. Eng. Chem. Res.**, vol. 34, pp. 1253–1266.
- TSANG, T. H., HIMMELBLAU, D. M., EDGAR, T. F., 1975, "Optimal control via collocation and nonlinear programming", **Int. J. Control**, 21(5), pp. 763–768.
- UBRICH, O., SRINIVASAN, B., STOESSEL, F., BONVIN, D., 1999, "Optimization of a semi-batch reaction system under safety constraints". In: *European control conference* (pp. F306.1–F306.6), Karlsruhe, Germany.
- UNGER, J., KRÖNER, A., MARQUARDT, W., 1995, "Structural analysis of differential-algebraic equation systems- theory and application", **Computers chem. Engng.**, 19, pp. 867–882.
- VASANTHARAJAN, S., BIEGLER, L. T., 1990, "Simultaneous strategies for optimization of differential-algebraic systems with enforcement error criteria". **Comput. Chem. Engng.**, v. 14, n. 10, pp. 1083–1100.
- VASSILIADIS, V. S., SARGENT, R. W. H., PANTELIDES, C. C., 1994a, "Solution of a Class of Multistage Dynamic Optimization Problems. 1. Problems without Path Constraints", **Process Design and Control by Ind. Eng. Chem. Res.**, v. 33, pp. 2111–2122.
- VASSILIADIS, V. S., SARGENT, R. W. H., PANTELIDES, C. C., 1994b, "Solution of a Class of Multistage Dynamic Optimization Problems 2. Problems with Path Constraints", **Process Design and Control by Ind. Eng. Chem. Res.**, v. 33, pp. 2123–2133.
- VASSILIADIS, V., 1993, *Computational Solution of Dynamic Optimization Problems with General Differential-Algebraic Constraints*, Ph.D. thesis, University of London, London, UK.

- VIEIRA, R. C, 2001, *Técnicas de Inicialização de Sistemas Algebrico-Diferenciais*, Tese de Doutorado, PEQ/COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- VIEIRA, R. C., BISCAIA JR, E. C., 2001, “Direct methods for consistent initialization of DAE systems”, ***Computers and Chemical Engineering***, v. 25, pp. 1299–1311.
- VISSER, E., SRINIVASAN, B., PALANKI, S., BONVIN, D., 2000, “A feedback-based implementation scheme for batch process optimization”. ***Journal of Process Control***, v.10, pp. 399–410.

Inicialização Consistente de EADs de índice superior

Códigos para integração numérica de sistemas de EAD requerem condições iniciais consistentes para fazer a integração iniciar com sucesso. Se a integração é iniciada a partir de um valor inicial inconsistente, a diferença entre o valor inicial consistente e o valor inicial arbitrário, representará uma contribuição constante ε_0 para o erro local na primeira etapa de integração. Visto que o erro local não desaparece mas aproxima-se do valor de ε_0 quando o tamanho do passo de integração é reduzido, as várias estratégias de controle do erro implementadas nos códigos de integração de EAD provavelmente falharão.

Muitos métodos rigorosos para inicialização de sistemas de EAD têm sido relatados, mas eles são em geral difíceis de aplicar. Por causa da inicialização rigorosa frequentemente requer a solução de um sistema algébrico não-linear, às vezes sobre-determinado, estes algoritmos devem falhar devido a problemas de convergência. Então, aproximações simplificadas e mais robustas são consideravelmente interessantes na simulação numérica de modelos de EADs. Neste contexto Vieira e Biscaia (2001) propuseram uma aproximação direta para a inicialização de sistemas de EADs, que é baseada na hipótese de que a resposta dinâmica de um modelo matemático pode ser aproximado pela resposta para perturbações descontínuas de um sistema similar, inicialmente em regime permanente.

Um algoritmo para encontrar uma inicialização consistente de EAD utilizando critério estrutural foi proposto por PANTELIDES (1988). O algoritmo detecta a presença de uma EAD de índice elevado e indica que equações devem ser diferenciadas para obter uma condição inicial consistente, ficando estabelecido que isto pode ser feito a partir de uma informação puramente estrutural. Um sistema semi-implícito geral não apresenta problemas de inicialização consistente se a matriz Jacobiana do sistema de equações for não singular. As restrições adicionais ao sistema de equações seguem o princípio de que um sub-conjunto de equações deve ser diferenciado se e somente se o grupo de linhas da matriz correspondentes a estas equações forem linearmente dependentes e se existirem linhas linearmente independentes dentro de sub-conjuntos deste grupo.

As condições iniciais de um sistema de EADs na sua forma geral:

$$f(\dot{x}, x, y, t) = 0 \quad 2.1$$

são definidas pelo vetor (\dot{x}_0, x_0, y_0) em t_0 , e não por (x_0, y_0) .

Uma condição necessária mas não suficiente para que estas condições iniciais sejam consistentes é que elas satisfaçam ao sistema:

$$f(\dot{x}_0, x_0, y_0, t_0) = 0 \quad 2.2$$

Por exemplo, é necessário que as condições iniciais $(x_{1_0}, x_{2_0}, \dot{x}_{1_0}, \dot{x}_{2_0})$ satisfaçam as seguintes EADs de índice 1 (PANTELIDES, 1988):

$$\dot{x}_1 + \dot{x}_2 = a(t) \quad 2.3$$

$$x_1 + x_2^2 = b(t) \quad 2.4$$

onde $a(t)$ e $b(t)$ são funções contínuas e diferenciáveis.

Entretanto, para que exista a consistência, elas devem satisfazer também à equação resultante da diferenciação da segunda equação:

$$\dot{x}_1 + 2x_2\dot{x}_2 = b'(t) \quad 2.5$$

Portanto, mesmo os sistemas de índice 1, podem apresentar problemas de inicialização, que são inerentes a todos os sistemas de índice superior. Em outras palavras, enquanto a inicialização da maioria dos sistemas de índice 1 é similar à das EDOs, todos os sistemas de índice superior e alguns sistemas de índice 1 apresentam dificuldades, como as mostradas. Além disto, é preciso localizar e evitar as diferenciações de equações que não trazem informações adicionais. O que se busca, portanto, são formas de extrair dos sistemas informações fundamentais que estão nele contidas, mas que não são aparentes. Os atuais códigos numéricos de solução de EADs frequentemente falham ou se tornam extremamente ineficientes se os valores iniciais são inconsistentes (Pfeifer, 2007).